

Technische Universität Graz
Institut für Strömungslehre und Wärmeübertragung

AE&E Austria GmbH & Co KG
CFD-CoC/F&E

CFD-Simulation des SNCR- Verfahrens

Diplomarbeit

Verfasser:

Reinhard Gertl

Betreuer:

Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Günter Brenn
Technische Universität Graz

Dipl.-Ing. Dr.techn. Günter Gronald
AE&E Austria GmbH & Co KG

Roland Halter
Von Roll Umwelttechnik AG

Graz, April 2010

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich die Gelegenheit ergreifen, und mich bei allen Leuten bedanken, die mich bei der Erstellung der Diplomarbeit unterstützt haben. Zunächst bedanke ich mich herzlich bei meinen Betreuern, allen voran bei Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Günter Brenn, der durch seine richtungsweisenden Anregungen und wertvollen Korrekturen, sowie durch sein exzellentes Fachwissen wesentlich zum Gelingen der Arbeit beigetragen hat. Weiters bedanke ich mich bei meinen Betreueren Herrn Dipl.-Ing. Dr.techn. Günter Gronald und Herrn Halter Roland, dass sie jederzeit mit fachkundigem Rat zur Seite standen. Ganz besonderer Dank gilt Herrn Ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Helfried Steiner für die Diskussion vieler Ergebnisse und für die hilfreiche Unterstützung bei Fragen zu CFD-Simulationen, die entscheidend für den Erfolg der Arbeit war.

Außerdem bedanke ich mich bei all jenen AE&E Austria-Mitarbeitern der Abteilung CFD-CoC/F&E, die mit ihren fachlichen Kenntnissen zum Gelingen der Diplomarbeit beigetragen haben, insbesondere Herrn Dipl.-Ing. Martin Koller, Herrn Georg Pleschutznig und Herrn Dipl.-Ing. Paul Renetzedner.

Schließlich möchte ich hier meinen Eltern und meinem Bruder gegenüber meine Dankbarkeit ausdrücken, für die Unterstützung während des gesamten Studiums, ohne deren Beistand eine so erfüllte Studienzeit nicht möglich gewesen wäre. Weiters bedanke ich mich bei all meinen Freunden, die mir während der Erstellung dieser Arbeit zur Seite standen.

Kurzfassung

Der Inhalt der vorliegenden Arbeit befasst sich mit der Entwicklung einer Methodik zur numerischen Simulation des SNCR-Verfahrens (eng. SNCR: Selective Non-Catalytic Reduction), die mit dem kommerziellen Simulationsprogramm Fluent 12.0 durchgeführt wird. In einem Teil der Arbeit wird der Eindüsungsvorgang eines Wasserdampf-Ammoniak-Gemisches in den Kessel an einer vereinfachten Geometrie berechnet und die Eindringtiefe, sowie die Verteilung der eingedüsten Spezies dargestellt. Die Simulationsergebnisse der Düsenströmung und des sich ausbildenden, unterexpandierten Hochdruck-Freistrahls werden durch Berechnung der isentropen eindimensionalen Düsenströmung und empirischer Beziehungen auf Plausibilität überprüft. Ebenso erfolgt eine qualitative Beurteilung der Rauchgasströmung durch dimensionslose Kennzahlen, um den Einfluss von Auftriebs-Trägheits- und Zähigkeitskräften, sowie der Schwerkraft auf die Strömungssituation festzustellen. Um die Mischungsqualität des eingedüsten Reduktionsmittels mit dem Rauchgas über die Kesselhöhe beurteilen zu können – die ein Maß für die Güte des Verfahrens ist – wird die Schwankungsbreite des Massenanteils dieser Spezies in mehreren Vertikalabständen über der Eindüsungsebene mit verschiedenen Randbedingungen berechnet.

In einem weiteren Aufgabenpunkt werden zur Beschreibung der Reaktionskinetik des SNCR-Verfahrens ein zweistufiger, ein siebenstufiger und ein 31-stufiger Reaktionsmechanismus an einer Rohrgeometrie untersucht. Die berechneten Ergebnisse der Stickstoffmonoxid-Reduktion und des Ammoniak-Schlupfs werden mit experimentellen Messwerten validiert. Bei der Auswahl des Reaktionsmechanismus für die Beschreibung des SNCR-Verfahrens wird auf industrielle Anwendbarkeit für Kesselberechnungen Wert gelegt.

Schließlich wird die Durchströmung des Kesselsegments mit den chemischen Reaktionen des ausgewählten Mechanismus berechnet. In einer Parameterstudie werden die Stickstoffmonoxid-Reduktion, der Ammoniak-Schlupf, sowie die Temperaturabnahme der Rauchgase, aufgrund des Wärmetransports durch die Kesselwand, mit mehreren Rauchgaseintrittstemperaturen berechnet und miteinander verglichen.

Abstract

The present diploma thesis deals with the development of a method for the numerical simulation of the SNCR process (SNCR: Selective Non-Catalytic Reduction), which is carried out with the commercial simulation software Fluent 12.0. One part of the thesis focuses on calculation of the injection process of a steam-ammonia-gas mixture into the boiler on a simplified geometry, where penetration and distribution of the injected species are shown. Numerical results for the nozzle flow and the developed underexpanded high-pressure jet are compared with calculations of the one-dimensional isotropic nozzle flow and empirical relations to ensure plausibility. Equally, qualitative evaluations of the flue gas flow are done with dimensionless key figures to study the effects of buoyancy, inertial and viscous forces, as well as gravity upon the flow situation. To examine the mixing between the injected reducing agent with the flue gas along the boiler height – which detects the quality of the process – the fluctuation of the species mass fraction is computed on several vertical levels above the plane of injection at different boundary conditions.

Another part of the study is concerned with the description of the reaction kinetics of the SNCR process, where an empirical two-step, a seven-step, and a 31-step mechanism are investigated on a tube geometry. The results, like nitric oxide reduction and ammonia slip, are validated with experimental measurements. Selecting the suitable reaction mechanism for the SNCR process description is done with focus on applicability for industrial use of the simulation.

Finally, computation of the flow passing through the simplified boiler geometry, including chemical reactions of the selected mechanism, is done. A parametric study compares nitric oxide reduction and ammonia slip, as well as flue gas temperature decrease while passing through the boiler, caused by heat transfer through the boiler wall, with several flue gas inlet temperatures.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, 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, 26. März 2010

Reinhard Geil

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	2
Kurzfassung	3
Abstract	4
Verzeichnis der Formelzeichen	9
1 Einleitung	16
1.1 Grundlagen des SNCR-Verfahrens.....	17
1.2 Das Von Roll SNCR-Verfahren	21
2 Aufgabenstellung	23
3 Grundlagen der Strömungsmechanik und des Stofftransports	24
3.1 Erhaltungsgleichungen.....	24
3.1.1 Die Kontinuitätsgleichung	24
3.1.2 Die Impulsgleichung	25
3.1.3 Die Energiegleichung.....	26
3.1.4 Erhaltungsgleichung für chemische Spezies	28
3.1.5 Allgemeine Transportgleichung	29
3.2 Turbulente Strömungen.....	29
3.2.1 Charakteristische Eigenschaften turbulenter Strömungen.....	30
3.2.2 Mathematische Formulierung turbulenter Strömungen.....	32
3.2.3 Reynolds-gemittelte Navier-Stokessche Gleichungen	34
3.2.4 Schließungsproblem.....	36
3.2.5 Simulation turbulenter Strömungen	37
3.3 Grenzschichten	47
3.3.1 Geschwindigkeitsgrenzschicht.....	48
3.3.2 Temperaturgrenzschicht	49
3.3.3 Wandbehandlung für die Turbulenzmodellierung	51
3.4 Kompressible Strömungen	58
3.4.1 Ideale Gase	59
3.4.2 Reale Gase.....	60
3.4.3 Verdichtungsstöße.....	60
3.4.4 Hochdruck-Freistrahlen	63
4 Numerische Simulation	66

4.1	Grundlagen der Diskretisierung.....	66
4.1.1	Finite Differenzen.....	66
4.1.2	Finite Volumen.....	67
4.1.3	Finite Elemente.....	68
4.2	Implementierung	69
4.3	Konvergenzkriterien	75
4.4	Anfangs- und Randbedingungen.....	75
5	Eindüsungsvorgang.....	77
5.1	Einleitung	77
5.2	Thermodynamik des Eindüsungsvorgangs	77
5.2.1	Berechnung der Randbedingungen.....	78
5.2.2	Freistrah.....	84
5.3	Beurteilung der Rauchgasströmung durch Kennzahlen	86
5.4	Geometrie und Randbedingungen	91
5.4.1	Geometrie.....	91
5.4.2	Randbedingungen und Modelle.....	96
5.5	Ergebnisse	99
5.5.1	Profile des Ammoniak-Massenanteils.....	99
5.5.2	Mischungsqualität.....	103
5.5.3	Mittengeschwindigkeit des Strahls.....	107
5.5.4	Überschallgebiet.....	109
6	Untersuchung der Reaktionsmechanismen	114
6.1	Einleitung	114
6.2	Numerische Berechnung chemischer Reaktionen	114
6.3	Reaktionsmechanismen	117
6.3.1	Der zweistufige Reaktionsmechanismus	117
6.3.2	Der 31-stufige Reaktionsmechanismus	119
6.3.3	Der siebenstufige Reaktionsmechanismus.....	123
6.4	Geometrie und Randbedingungen	124
6.4.1	Geometrie.....	125
6.4.2	Randbedingungen	126
6.5	Ergebnisse	130
6.5.1	Stickstoffmonoxid-Reduktion	130
6.5.2	Ammoniak-Schlupf.....	133

6.5.3	Einfluss der Verweilzeit.....	136
7	Durchströmung des Kessels mit chemischen Reaktionen	140
7.1	Einleitung	140
7.2	Wärmeübertragung	140
7.3	Geometrie und Randbedingungen	143
7.3.1	Geometrie.....	143
7.3.2	Randbedingungen	145
7.4	Modelle und Reaktionsmechanismus.....	146
7.4.1	Modelle und Einstellungen.....	146
7.4.2	Reaktionsmechanismus.....	147
7.5	Ergebnisse	147
7.5.1	Ammoniak-Schlupf und Stickstoffmonoxid-Reduktion	147
7.5.2	Verweilzeit der Rauchgase	150
7.5.3	Profile des Ammoniak-Massenanteils.....	151
7.5.4	Profile des Stickstoffmonoxid-Massenanteils.....	154
7.5.5	Temperaturprofile im Kessel	158
7.5.6	Kesselwand	160
7.5.6.1	Temperaturprofil	160
7.5.6.2	Wärmestromdichte	161
8	Zusammenfassung	163
	Literaturverzeichnis	165

Verzeichnis der Formelzeichen

Lateinische Buchstaben

A_i	Fläche der Zelle i (m^2)
A_r	präexponentieller Faktor im Arrhenius-Ansatz ($1/\text{sK}^{\beta_r}$, $\text{m}^3/\text{sK}^{\beta_r}\text{kmol}$)
a	Absorptionskoeffizient (-)
C	anisotroper Phasenkoeffizient (-)
$C_{\mu}, C_{1\varepsilon}, C_2, C_{2\varepsilon}$	Konstante im k, ε -Modell (-)
C_{ξ}, C_{τ}	Konstante im EDC-Modell (-)
$C_{j,r}$	molare Konzentration der Spezies j (kmol/m^3)
c	Schallgeschwindigkeit (m/s)
c_p	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck (J/kgK)
$c_{p,W}$	spezifische Wärmekapazität der Kesselwand (J/kgK)
c_v	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen (J/kgK)
D	Eintrittsdurchmesser der Düse (m)
D_H	hydraulischer Durchmesser (m)
D_R	Durchmesser der Rohrgeometrie (m)
D_{Y_j}	Diffusionskoeffizient der Spezies j (m^2/s)
d	Austrittsdurchmesser der Düse (m)
E	spezifische, totale Energie (J/kg)
E	empirische Konstante (-)
Ec	Eckert-Zahl (-)
E_r	Aktivierungsenergie im Arrhenius-Ansatz (J/kmol)
Fr	Froude-Zahl (-)
f	Querschnittsfläche am Düsenaustritt (m^2)
G	einfallende Strahlung (W/m^3)
Gr	Grashof-Zahl (-)

g	Erdbeschleunigung (m/s^2)
g_i	Momentanwert der Strömungsgröße
g'_i	Schwankungsanteil der Strömungsgröße
\bar{g}_i	zeitlicher Mittelwert der Strömungsgröße
h_j	spezifische Enthalpie der Spezies j (J/kg)
I	turbulente Intensität (%)
k	turbulente kinetische Energie (m^2/s^2)
$k_{b,r}$	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante der Rückreaktion
k_{eff}	effektive Leitfähigkeit (W/mK)
$k_{f,r}$	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante der Vorwärtsreaktion
k_t	turbulente Leitfähigkeit (W/mK)
L	charakteristische Länge (m)
L_R	Länge der Rohrgeometrie (m)
L_S	relativer Abstand des Geradstoßes (m)
L_Z	Länge der ersten Strahlzelle (m)
M	Mach-Zahl (-)
M_t	turbulente Mach-Zahl (-)
M_j	molare Masse der Spezies j (kg/kmol)
M_0	Mach-Zahl am Düsen Eintritt (-)
m	Gesamtmasse (kg)
m_j	Masse der Spezies j (kg)
\dot{m}	Massenstrom der Düsenströmung (kg/s)
\dot{m}_R	Massenstrom der Rohrströmung (kg/s)
\dot{m}_{RG}	Massenstrom am Rauchgaseintritt (kg/s)
Nu	Nußelt-Zahl (-)
n	Brechungsindex (-)
Pr	molekulare Prandtl-Zahl (-)
Pr_t	turbulente Prandtl-Zahl (-)
p	Druck (Pa)

p_A	statischer Druck am Rohr- oder Rauchgasaustritt (Pa)
p_{op}	Betriebsdruck (Pa)
p_0	Totaldruck (Pa)
p_0	statischer Düsenvordruck (Pa)
$p_{0,tot}$	Totaldruck am Düseneintritt (Pa)
p_k	kritischer Druck (Pa)
p_1	Gegendruck (Pa)
q	gesamte Wärmestromdichte (W/m^2)
q_r	Strahlungswärmestromdichte (W/m^2)
R	spezifische Gaskonstante (J/kgK)
Re	Reynolds-Zahl (-)
Re_{krit}	kritische Reynolds-Zahl (-)
Re_y	turbulente Reynolds-Zahl (-)
$\hat{R}_{i,r}$	Produktions- bzw. Zersetzungsrate der Spezies i ($kmol/m^3s$)
R_j	Produktions- bzw. Zersetzungsrate der Spezies j (kg/m^3s)
$S_h, S_k, S_{Y_j}, S_\varepsilon, S_\psi$	Quellen- oder Senkenterm
s	Wandstärke der Kesselwand (m)
T	Temperatur (K)
T_k	Temperatur im Düsenaustritt (K)
T_R	Temperatur der Rohrströmung am Eintritt (K)
T_{RG}	Temperatur am Rauchgaseintritt (K)
$T_{W,a}$	Temperatur der Wandaußenseite (K)
$T_{W,i}$	mittlere Temperatur der Wandinnenseite (K)
T_0	Totaltemperatur (K)
T_0	statische Temperatur am Düseneintritt (K)
$T_{0,tot}$	Totaltemperatur am Düseneintritt (K)
t	Zeit (s)
U	charakteristische Geschwindigkeit (m/s)

\bar{U}	Rauchgaseintrittsgeschwindigkeit (m/s)
U_∞	Strömungsgeschwindigkeit außerhalb der Grenzschicht (m/s)
u_i	Strömungsgeschwindigkeit in Koord.-Richtung i (m/s)
u_τ	Schubspannungsgeschwindigkeit (m/s)
v	spezifisches Volumen (m ³ /kg)
\vec{v}	Vektor der Strömungsgeschwindigkeit (m/s)
w_j	Massenanteil der Spezies j (-)
w_k	kritische Geschwindigkeit am Düsenaustritt (m/s)
w_1	Geschwindigkeit im Freistrahle (m/s)
w_0	Geschwindigkeit am Düseneintritt (m/s)
X_{NH_3}	Ammoniak-Schlupf (%)
X_{NO}	Stickstoffmonoxid-Reduktion (%)
x	Koordinate (m)
x_i	Koordinatenrichtung i (m)
x_i	Ammoniak-Massenanteil der Zelle i (-)
x_0	flächengewichteter Ammoniak-Massenanteil (-)
Y_j	Massenanteil der Spezies j (-)
y	Koordinate (m)
y^+	dimensionsloser Wandabstand (-)
y^*	dimensionsloser Wandabstand (-)
z	Koordinate (m)

Griechische Buchstaben

α	konvektiver Wärmeübergangskoeffizient (W/m ² K)
α	Unterrelaxationsfaktor (-)
α_i	Wärmeübertragungskoeffizient der Wandinnenseite (W/m ² K)
β	Ablenkwinkel (°)

β	thermischer Ausdehnungskoeffizient (1/K)
β_r	Temperaturexponent im Arrhenius-Ansatz (-)
Γ	allgemeiner Diffusionskoeffizient (m ² /s)
δ	Dicke der Geschwindigkeitsgrenzschicht (m)
δ_t	Dicke der thermischen Grenzschicht (m)
δ_{ij}	Kronecker-Delta (-)
ε	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie (m ² /s ³)
ε_W	Emissionskoeffizient der Wandinnenseite (-)
$\eta'_{j,r}$	Geschwindigkeitsexponent (-)
λ	Wärmeleitfähigkeit (W/mK)
λ_W	Wärmeleitfähigkeit der Kesselwand (W/mK)
κ	Kármánsche Konstante (-)
κ	Isentropenexponent (-)
μ	dynamische Viskosität (kg/ms)
μ_t	turbulente Wirbelviskosität (kg/ms)
ν	kinematische Viskosität (m ² /s)
$\nu'_{i,r}, \nu''_{i,r}$	stöchiometrischer Koeffizient (-)
ν_k	kritischer Wert der Geschwindigkeitsfunktion (-)
ξ^*	Längenanteil der feinen Strukturen im EDC-Modell (-)
ρ	Dichte (kg/m ³)
ρ_W	Dichte der Kesselwand (kg/m ³)
ρ_0	Dichte am Düsen Eintritt (kg/m ³)
$\rho_{0,tot}$	totale Dichte am Düsen Eintritt (kg/m ³)
σ	Stefan-Boltzmann-Konstante (W/m ² K ⁴)
σ	Schwankungsbreite (-)
σ	Stoßwinkel (°)
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	Turbulente Prandtl-Zahlen im k, ε -Modell (-)
σ_s	Streuungskoeffizient (-)
τ	Reaktionszeit (s)

τ_{ij}	Spannungstensor (N/m ²)
τ_l	laminare Schubspannung (N/m ²)
τ_t	turbulente Schubspannung (N/m ²)
τ_W	Wandschubspannung (N/m ²)
τ^*	Zeitskala im EDC-Modell (s)
ψ	beliebige skalare Größe
ψ_{max}	Maximalwert der Durchflussfunktion (-)

Abkürzungen

AMG	Algebraic Multigrid Methode
BImSchV	Bundes-Immissionsschutzverordnung
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl
EDC	Eddy-Dissipation Concept
EDM	Eddy-Dissipation Modell
DNS	Direct Numerical Simulation
Gew.-%	Gewichtsprozent
ILU	Incomplete Lower Upper-Faktorisierung
ISAT	In-Situ Adaptive Tabulation
LES	Large Eddy Simulation
NSR	Normalized Stoichiometric Ratio
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes-Equations
RNG	Re-Normalisation Group
RSM	Reynolds Stress Modell
SNCR	Selective Non-Catalytic Reduction
Vol.-%	Volumsprozent
WSGGM	Weighted Sum of Gray Gases Modell

Chemische Elemente

H_2	Wasserstoff
N_2	Stickstoff
O_2	Sauerstoff

Chemische Verbindungen

$CO(NH_2)_2$	Harnstoff
CO	Kohlenmonoxid
CO_2	Kohlendioxid
H_2O	Wasser
NH_2	Ammoniumradikal
NH_3	Ammoniak
NO	Stickstoffmonoxid
NO_x	Stickoxid
SiC	Siliziumkarbid
SO_3	Schwefeltrioxid

1 Einleitung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der CFD-Simulation (eng. CFD: Computational Fluid Dynamics) des SNCR-Verfahrens (eng. SNCR: Selective Non-Catalytic Reduction) in Müllverbrennungsanlagen, die mit dem kommerziellen Simulationsprogramm Fluent 12.0 durchgeführt wird. In der Produktentwicklung von verfahrenstechnischen Anlagen nehmen heute rechnergestützte Simulationen eine wichtige Rolle ein, da sie in der Lage sind, den Produktentstehungsprozess wesentlich zu verkürzen und Kosten einzusparen. So können bereits in der Entwurfsphase verschiedene Varianten analysiert und die Anzahl der Prototypen verringert werden.

In der Regel erlauben Simulationsprogramme die Auswertung sämtlicher physikalischer Größen in beliebigen Stellen des Objekts, deren Messung unter realen Verhältnissen oft schwierig und mit hohem Aufwand verbunden sein kann. In den letzten Jahren führten die rasante Steigerung der Rechnerkapazitäten und die Entwicklung der CFD-Codes zu einem Hilfsmittel, das für viele Aufgabenbereiche in der Ingenieurstätigkeit nun verstärkt zum Einsatz kommt. In Müllverbrennungsanlagen wird das SNCR-Verfahren seit rund 20 Jahren erfolgreich eingesetzt und stellt heute den Stand der Technik als Technologie zur wirtschaftlichen Reduktion von Stickoxiden in Rauchgasen aus vielen feuerungstechnischen Anlagen dar [46]. Im Bundes-Immissionsschutzgesetz von Deutschland sind in der Durchführungsverordnung der 17. BImSchV (Verordnung über die Verbrennung und Mitverbrennung von Abfällen), die als richtungweisend für viele europäische Länder gilt, die Emissionsgrenzwerte für Abfallverbrennungsanlagen festgelegt, woraus spezifische Anforderungen an das SNCR-Verfahren als Sekundärmaßnahme zur Stickoxidreduktion resultieren.

Eine effiziente Reduktion der Stickoxide von Feuerungsanlagen erfordert u.a. eine ausreichende Vermischung des zugeführten Reduktionsmittels mit den Rauchgasen. Daher wird der Eindüsungsvorgang durch ein CFD-Modell dargestellt und die Ammoniakverteilung in bestimmten Querschnitten einer vereinfachten Kesselgeometrie berechnet. In weiterer Folge wird ein geeigneter Reaktionsmechanismus, der die wesentlichen Einflussparameter auf das SNCR-Verfahren beschreiben kann, in das CFD-Modell implementiert und die Reduktion des Stickstoffmonoxids,

sowie der Ammoniak-Schlupf berechnet. Um die Temperaturabnahme der Rauchgase während des Durchströmens des Kessels darzustellen, wird der Wärmetransport durch die Kesselwand im Simulationsmodell abgebildet. Das CFD-Modell des SNCR-Verfahrens wird so Schritt für Schritt aufgebaut. Um den Rechenaufwand einzugrenzen, wird aus dem realen Kessel ein Segment herausgeschnitten. An diesem Segment – der Testgeometrie – wird der Eindüsungsvorgang simuliert. Das bessere Verständnis des Eindüsungsvorgangs soll einen wesentlichen Beitrag zur Verfahrensoptimierung leisten.

1.1 Grundlagen des SNCR-Verfahrens

Das SNCR-Verfahren ist eine Technologie zur Reduktion von Stickoxiden in Rauchgasen von Feuerungsanlagen. Die Zerlegung der Stickoxide findet, abhängig von der Rauchgaszusammensetzung, in einem optimalen Temperaturfenster zwischen 900°C und 1050°C statt. In Abbildung 1 sind die Anteile der Ammoniak-Oxidation, des Ammoniak-Schlupfs, der Stickstoffmonoxid-Bildung und der Stickstoffmonoxid-Reduktion an der ablaufenden Ammoniak-Reaktion im Temperaturbereich von 650 bis 1250°C dargestellt.

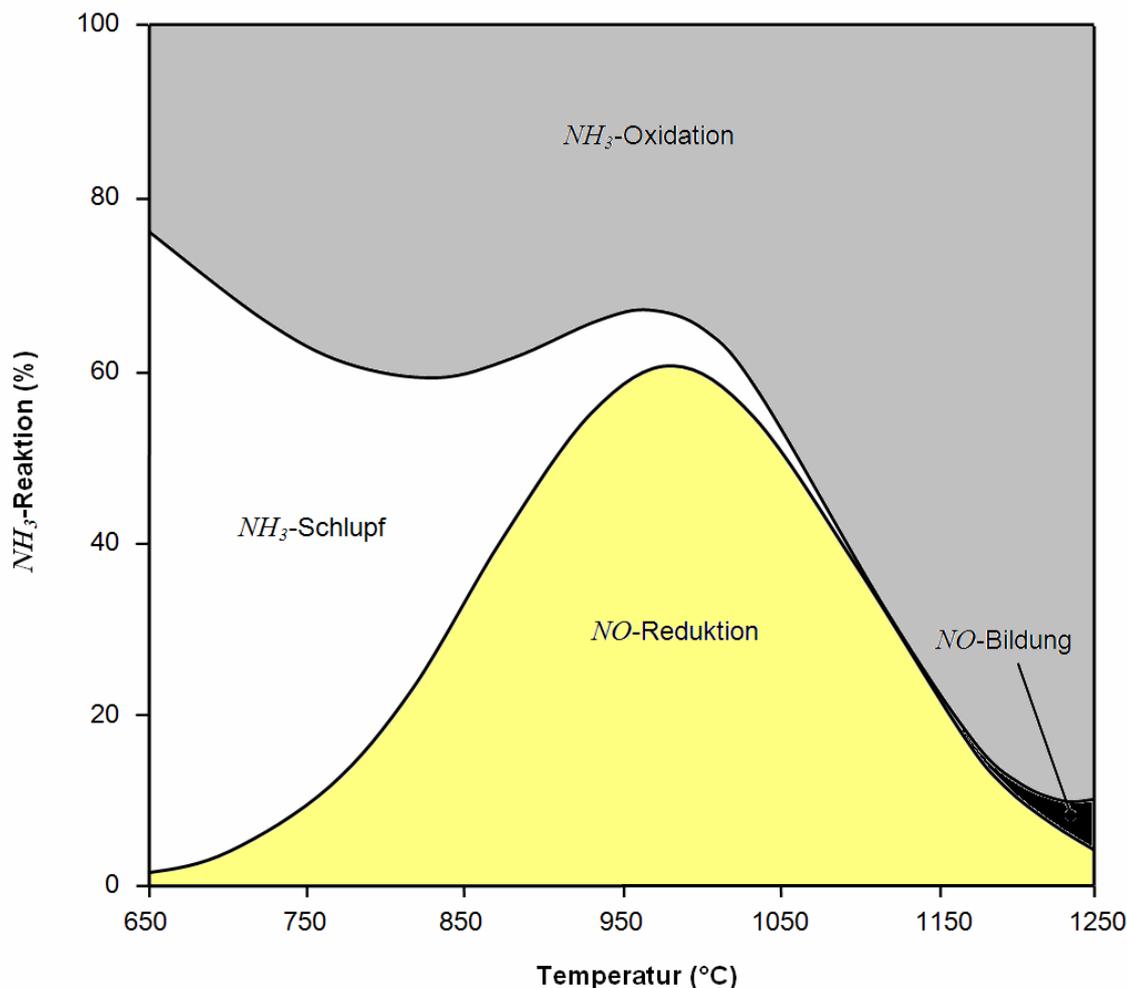


Abbildung 1: NH_3 -Oxidation, NH_3 -Schlupf, NO -Bildung und NO -Reduktion im Temperaturbereich von 650 bis 1250°C [14] zitiert von [47].

Liegt die Temperatur an der Eindüsungsstelle zu niedrig, so können die Stickoxide NO_x nicht ausreichend reduziert werden – die Reaktion für die Stickoxid-Reduktion läuft zwar ab, aber sehr träge – und der Ammoniak-Schlupf, der das Verhältnis von Ammoniakmassenstrom am Rauchgasaustritt zu eingedüstem Ammoniakmassenstrom beschreibt, steigt. Zu hohe Temperaturen führen zur Oxidation des Reduktionsmittels, der Ammoniakverbrauch steigt an, und zusätzliches Stickoxid wird gebildet. Der Anteil der unerwünschten Nebenreaktionen beträgt bei der optimalen Eindüsungstemperatur von 970°C für 25 gew.-%iges Ammoniakwasser und einem molaren, stöchiometrischen Verhältnis (Reduktionsmittel zu Stickoxidfracht) von Eins annähernd 40% [47].

Im optimalen Temperaturbereich werden Reduktionsmittel in wässrigen Lösungen (Ammoniakwasser oder Harnstofflösung) oder gasförmig (Ammoniak) direkt in den

Feuerraum eingedüst. Entsprechend den Hauptreaktionen nach Gl. (1.1) für Ammoniak NH_3 und nach Gl. (1.2) für Harnstoff $CO(NH_2)_2$ [46]



bilden sich Kohlendioxid CO_2 , Stickstoff N_2 und Wasser H_2O . Die Abhängigkeit der Reaktionen von dem schmalen Temperaturfenster erfordert die Eindüsung des Reduktionsmittels auf mehreren Ebenen, um dem Verlauf des Temperaturprofils im Kessel folgen zu können.

Die Umschaltung zwischen den einzelnen Eindüsungsebenen erfolgt i.d.R. aufgrund einer Referenztemperaturmessung. Prinzipiell sind bei allen Entstickungsverfahren hohe Stickoxid-Abscheidegrade bei mäßigem Reduktionsmittelverbrauch und geringem Ammoniak-Schlupf anzustreben, da stark überstöchiometrische Dosierung des Reduktionsmittels zu Sekundärproblemen wie der Bildung von Ammoniaksalzen führen kann. Um eine effiziente Reduktion der Stickoxide zu erreichen, müssen eine ausreichende Durchmischung des Reduktionsmittels mit dem Rauchgas sichergestellt und eine Mindestverweilzeit im optimalen Temperaturbereich eingehalten werden.

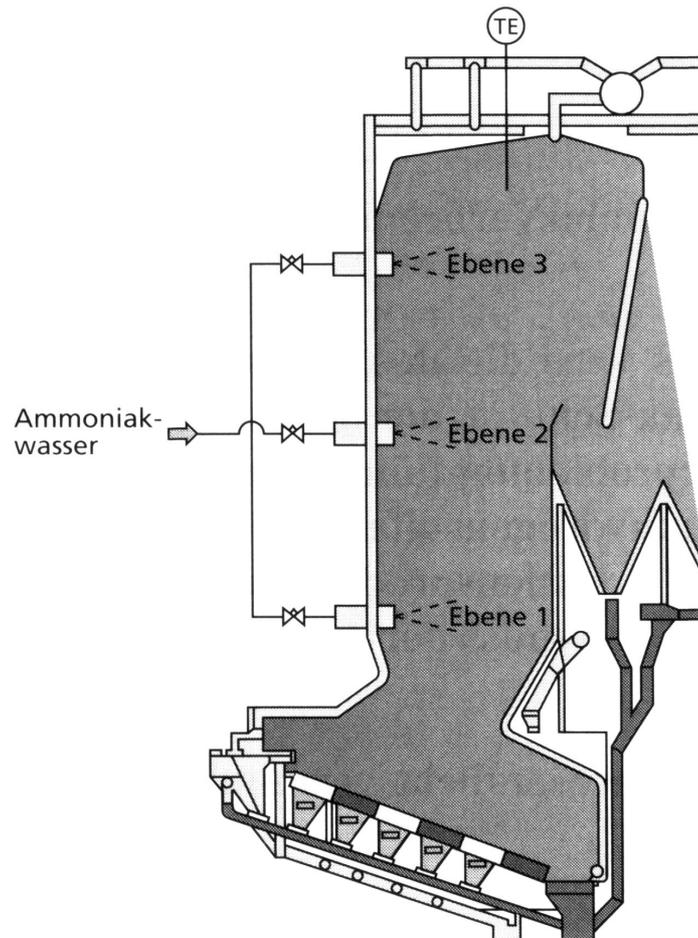


Abbildung 2: Eindüsungsebenen auf mehreren Höhenkoten für die Eindüsung des Reduktionsmittels in den Kessel [14] zitiert von [47] (schematische Darstellung).

Das auf Harnstoff basierende Verfahren gründet auf folgenden vier Schritten [46]:

1. Verteilung der harnstoffhaltigen Wassertropfen im Rauchgas,
2. Verdampfung der Wassertropfen, in denen der Harnstoff gelöst ist,
3. Zersetzung des Harnstoffs in reaktionsfähige Radikale,
4. Gasphasenreaktion zwischen NH_2 und NO_x .

Dem in der wässrigen Lösung enthaltenen Harnstoff ist es erst möglich reaktionsfähige Radikale zu bilden, wenn das Wasser vollständig verdampft ist. Wird Ammoniakwasser anstatt des Harnstoffs als Reduktionsmittel in den Feuerraum des Kessels eingedüst, so findet die Stickoxid-Reduktion unmittelbar nach dem Eindüsungsvorgang statt [46]. Das Reduktionsmittel Ammoniak reagiert ohne Zersetzungsvorgang mit den Stickoxiden. Der Größe der eingedüsten Tropfen kommt insofern eine wichtige Rolle zu, da sie die Eindringtiefe in den Feuerraum und die Verdampfungszeit vorgibt. Sind die Tropfen zu groß, so dauert der Verdamp-

fungsvorgang zu lang, und die Reaktionen könnten unter Umständen außerhalb des optimalen Temperaturfensters ablaufen. Zu kleine Tropfen würden zu rasch verdampfen und entweder zu nahe an der kalten Kesselwand oder an zu heißen Stellen im Feuerraum des Kessels reagieren [46].

Kommt hingegen Ammoniakwasser beim SNCR-Verfahren zum Einsatz, so dampft das Ammoniak am Eintritt in den Feuerraum unmittelbar in die Abgase aus. Um die erforderliche Eindringtiefe zu erreichen wird der benötigte Impuls, aufgrund der geringeren Dichte der Gasphase, durch höhere Durchsätze des Treibmediums mit größerem Energieaufwand erzeugt [46].

1.2 Das Von Roll SNCR-Verfahren

Beim Von Roll SNCR-Verfahren [11] wird Ammoniak als Reduktionsmittel zur Reduzierung der Stickoxide in Müllverbrennungsanlagen direkt in den Kessel eingedüst. Die Reduktion erfolgt in einem Temperaturbereich zwischen 850 und 1000°C nach Gl. (1.3) [11].



Bei zu niedriger Temperatur an der Eindüsungsstelle läuft die Reduktion der Stickoxide ohne Katalysator nur langsam ab und erfordert einen hohen Reduktionsmittelüberschuss, wodurch ein großer Anteil des Ammoniakgases unverbraucht zur Rauchgasreinigung gelangt. Liegt die Feuerraumtemperatur an der Eindüsungsstelle zu hoch, so finden zusätzlich unerwünschte Nebenreaktionen nach Gl. (1.4) und Gl. (1.5) statt [11].



Das enge Temperaturfenster erfordert für eine wirkungsvolle Entstickung der Rauchgase in mehreren Vertikalabständen Eindüsungsebenen im Feuerungsraum, da das Temperaturprofil in Müllverbrennungsanlagen aufgrund der hetero-

genen Brennstoffzusammensetzung und variabler Lastzustände Schwankungen unterworfen ist. Aufgrund einer Referenztemperaturmessung im Feuerraum wird jene Eindüsungsebene aktiviert, die am besten mit der optimalen Eindüsungstemperatur korreliert.

Das Reduktionsmittel Ammoniakgas wird in Form von Salmiakgeist (25% Ammoniak) mit einem Treibmedium (Wasserdampf oder Luft) in den Kessel eingedüst. Um ein Verstopfen der Düsen zu vermeiden, strömt ständig eine geringe Menge des Treibmediums durch die Düsen, auch wenn kein Reduktionsmittel zugeführt wird. Eine möglichst gleichmäßige Verteilung des Reduktionsmittels in der gerade betriebenen Eindüsungsebene wird durch Eindüsung, ausgehend von mehreren Seitenwänden des Feuerraums erzielt.

Der erforderliche Ammoniakdurchsatz wird durch eine Stickoxid-Messung im gereinigten Rauchgas geregelt. Hohe Stickoxid-Abscheidegrade können nur durch überstöchiometrische Dosierung von Ammoniak erreicht werden. Ohne Reduktionsmittelüberschuss kann eine Stickoxidabscheidung von nur rund 50% erwartet werden. Die überstöchiometrische Zugabe des Ammoniaks ist bei Verwendung eines Nasswäschers unproblematisch, weil das unverbrauchte Reduktionsmittel in Wasser leicht in Lösung geht, abgeschieden werden kann, und nach der Ammoniakrückgewinnung erneut in den Feuerraum des Kessels eingedüst wird [11].

2 Aufgabenstellung

Die modellgerechte Darstellung des Eindüsungsvorgangs stellt das Kernstück der Diplomarbeit „CFD-Simulation des SNCR-Verfahrens“ dar. Das Ziel ist es, das Eindüungsverhalten – Eindringtiefe und Verteilung des Reduktionsmittels – in einer einfachen Testgeometrie aufzuzeigen und so die Verfahrensoptimierung voranzutreiben. Die Simulationen werden mit dem CFD-Programm Fluent 12.0 durchgeführt. Die Ergebnisse aus den CFD-Simulationen sollen auf Plausibilität überprüft werden.

Die wesentlichen Punkte der Aufgabenstellung umfassen:

1. Strömungssimulation des Eindüsungsvorgangs von Gemischen bestehend aus Wasserdampf und Ammoniak in den Kessel.
2. Berechnung der Verteilung einer eingedüsten Spezies in mehreren Vertikalabständen über der Eindüsungsebene als Maß für die Effizienz des Verfahrens.
3. Untersuchung von Reaktionsmechanismen zur Umsetzung von Stickoxiden an einer einfachen Geometrie.
4. Berechnung der Durchströmung des Kessels mit chemischen Reaktionen.
5. Durchführen von Parameterstudien.

3 Grundlagen der Strömungsmechanik und des Stofftransports

3.1 Erhaltungsgleichungen

Um komplexe physikalische Vorgänge mit Hilfe eines Rechners simulieren zu können, ist die reale Situation in Form eines mathematischen Modells abzubilden. Basierend auf den Erhaltungssätzen der Kontinuumsmechanik und Thermodynamik werden Gleichungssysteme formuliert. Diese sind aufgrund räumlicher und zeitlicher Abhängigkeit der gesuchten Funktionen ein System partieller Differentialgleichungen. Wichtig für das Verständnis zur Handhabung der auftretenden Gleichungen ist die Tatsache, dass sie alle als Spezialfälle einer allgemeinen Transportgleichung dargestellt werden können, die im Abschnitt 3.1.5 dargestellt wird und physikalisch ähnliche Phänomene der Erhaltungssätze aufzeigt.

Die Beschreibung der Vorgänge in Fluiden wird durch mathematische Formulierung der grundlegenden physikalischen Erkenntnisse, der so genannten Erhaltungssätze von

- Masse
- Impuls
- Energie
- chemischer Spezies

ermöglicht. Zur Lösung des in dieser Arbeit in dreidimensionaler Form vorliegenden Problems müssen die aus den Erhaltungssätzen resultierenden Gleichungen gelöst werden. Die Erhaltungsgleichungen werden im Folgenden in kartesischen Koordinaten angeschrieben, können jedoch grundsätzlich auch in jedem beliebig gekrümmten Koordinatensystem formuliert werden.

3.1.1 Die Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung basiert auf dem Axiom, dass Masse weder erzeugt noch vernichtet werden kann [9]. Die Kontinuitätsgleichung, formuliert in kartesischen Koordinaten, lautet in differenzieller Form

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0. \quad (3.1)$$

Die Größe ρ ist die Dichte des Fluids, t die Zeit, und u_i stellt die kartesischen Geschwindigkeitskomponenten mit $i = x, y, z$, entsprechend den drei Raumrichtungen im dreidimensionalen Fall dar. Der erste Term beschreibt die lokale, zeitliche Änderung der Masse pro Volumeneinheit, und der zweite Term, die Divergenz des Massenstromdichtevektors, die Änderung aufgrund von Massenfluss über die Oberfläche des differentiellen Kontrollvolumens. Letzterer Term ist in Einsteinischer Indexschreibeweise formuliert.

3.1.2 Die Impulsgleichung

Die Impulsgleichung basiert auf dem zweiten Newtonschen Gesetz und besagt, dass die zeitliche Änderung des Impulses eines Körpers gleich der Summe aller am Körper angreifenden Oberflächen- und Volumenkräfte ist. Die Gleichung lautet allgemein [9]

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i^B, \quad (3.2)$$

wobei die Indizes i und j wieder die kartesischen Koordinatenrichtungen ($i, j = x, y, z$ für dreidimensionale Strömungen), t die Zeit und ρ die Dichte des Fluids bedeuten. Die Größen u_i und u_j sind die kartesischen Geschwindigkeitskomponenten in die Koordinatenrichtungen i und j , und p ist der im Strömungsfeld herrschende statische Druck. Die Impulsgleichung enthält die allgemeine Formulierung des Spannungstensors τ_{ij} , der für newtonsche Fluide durch das Stokessche Reibungsgesetz mit dem Geschwindigkeitsgradienten in Verbindung steht. Die Größe f_i^B multipliziert mit der Dichte ρ , ist eine volumenspezifische Volumenkraft, wie z.B. die Schwerkraft, die Fliehkraft oder die Corioliskraft.

Der erste und zweite Term auf der linken Seite der Gl. (3.2) bezeichnen die lokale zeitliche Änderung des Impulses und die Impulsänderung resultierend aus Impulsflüssen über die Oberfläche des differentiellen Volumens. Erster Term auf der

rechten Seite ist der Druckterm, zweiter Term berücksichtigt die viskosen Spannungen, und der dritte Term beschreibt die angesprochenen Volumenkräfte.

Das erwähnte Stokessche Reibungsgesetz für newtonsche Fluide formuliert den obigen Spannungstensor τ_{ij} durch die folgende Gleichung

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right). \quad (3.3)$$

Hier steht μ für die dynamische Viskosität, und das Zeichen δ_{ij} ist das Kroncker-Delta, welches für $i = j$ den Wert 1, und sonst den Wert 0 annimmt.

3.1.3 Die Energiegleichung

Die Erhaltungsgleichung der Energie begründet sich auf folgendem Axiom: „Die zeitliche Änderung der gesamten (kinetischen und inneren) Energie eines Körpers (= Kontrollvolumen) = Summe der Leistungen der am Körper angreifenden Kräfte, der durch Leitung transportierten Wärmeleistung, und der Wärmezufuhr aus inneren Wärmequellen“ [9]. Folgende Form der Energiegleichung wird zur Lösung des in dieser Arbeit auftretenden Strömungs- und Wärmeübertragungsproblem herangezogen [3].

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \left(\vec{v}(\rho E + p) \right) = \nabla \left(k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\tau}_{eff}) \right) + S_h \quad (3.4)$$

Hier bedeuten ρ die Dichte des Fluids, E die spezifische totale Energie und p der im Medium vorherrschende Druck. Die Größe k_{eff} steht für die effektive Wärmeleitfähigkeit und ergibt sich aus

$$k_{eff} = k + k_t. \quad (3.5)$$

k ist hierin die Wärmeleitfähigkeit des Fluids und k_t die turbulente Leitfähigkeit, die abhängig vom Turbulenzmodell entsprechend definiert ist.

\vec{J}_j beschreibt die Diffusion der Spezies j . Die ersten drei Terme auf der rechten Seite in Gl. (3.4) geben den Energietransport aufgrund von Konvektion, Speziesdiffusion und viskoser Dissipation an. S_h berücksichtigt beispielsweise Wärme von chemischen Reaktionen, die in einem Teil dieser Arbeit berechnet werden. Es besteht im Simulationsprogramm außerdem die Möglichkeit, beliebige volumenspezifische Wärmequellen oder -senken festzulegen, die ebenfalls durch den Term S_h in der Energiegleichung mit einbezogen werden. Weiter gilt für E in Gl. (3.4) die Beziehung

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2}, \quad (3.6)$$

wobei die Enthalpie h für ideales Gas berechnet wird mit

$$h = \sum_j Y_j h_j. \quad (3.7)$$

Y_j ist der Massenanteil der Spezies j , der als Verhältnis der Masse dieser Spezies j in einem bestimmten Volumen zur Gesamtmasse m im selben Volumen definiert ist. Der Massenanteils Y_j berechnet sich durch

$$Y_j = \frac{m_j}{m}. \quad (3.8)$$

Für h_j gilt der bekannte Zusammenhang

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T c_{p,j} dT, \quad (3.9)$$

mit der Referenztemperatur $T_{ref} = 298.15\text{K}$ und der spezifischen Wärmekapazität c_p .

3.1.4 Erhaltungsgleichung für chemische Spezies

Die Anwendung der allgemeinen Transportgleichung auf die Masse oder Stoffmenge einer chemischen Spezies in einem fluiden Gemisch führt zur Erhaltungsgleichung für diese Spezies. Sei die Masse z.B. durch den Massenanteil Y_j der chemischen Spezies j wiedergegeben, so folgt für die Erhaltungsgleichung der Spezies j [44]

$$\frac{\partial \rho Y_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_j u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial \Gamma_i}{\partial x_i} + S_{Y_j}, \quad (3.10)$$

hier bezeichnen der erste und der zweite Term links die lokale, zeitliche Änderung der Masse m_j der Spezies j und die Änderung aufgrund von Konvektion. Der erste Term rechts beschreibt den Transport durch Diffusion nach dem ersten Fickschen Gesetz

$$\Gamma_i = -\rho D_{Y_j} \frac{\partial Y_j}{\partial x_i}, \quad (3.11)$$

das die Teilchenstromdichte proportional zum Konzentrationsgradienten angibt, wobei D_{Y_j} der Diffusionskoeffizient ist. Bei genauerer Betrachtung erkennt man die Analogie des ersten Fickschen Gesetzes zur Fourierschen Wärmeleitungsgleichung, welche die Wärmestromdichte proportional zum Temperaturgradienten beschreibt. Der zweite Term rechts in der Erhaltungsgleichung (3.10) bildet Quellen oder Senken der transportierten Größe Y_j aufgrund von chemischen Reaktionen ab, deren Vorzeichen davon abhängt, ob Produktion oder Zersetzung der betreffenden Spezies erfolgt.

3.1.5 Allgemeine Transportgleichung

Die Allgemeine Transportgleichung [4], formuliert an einem differentiellen Kontrollvolumen für die beliebige skalare Größe ψ , beschreibt das Transportphänomen folgendermaßen

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\psi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \psi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \right] + S_\psi. \quad (3.12)$$

Die allgemeine Transportgleichung beschreibt die Spezialfälle der Erhaltung für die Masse mit $\psi = 1$ Gl. (3.1), für den Impuls mit $\psi = u_i$ Gl. (3.2), für die Energie mit $\psi = E$ Gl. (3.4) und für die Spezies mit $\psi = Y_j$ Gl. (3.10). Der erste Term in der Transportgleichung gibt die zeitliche Änderung von ψ im differentiellen Volumen an, der zweite Term, der sogenannte Konvektionsterm, beschreibt den Transport von ψ aufgrund der Geschwindigkeit u_j . Der Diffusionsterm – erster Term auf der rechten Seite – gibt den Transport der Größe ψ bedingt durch ihren Gradienten an, und S_ψ berücksichtigt sämtliche Quellen und Senken der transportierten Größe ψ , die z.B. äußere Kräfte oder innere Wärme- oder Stoffquellen aufgrund chemischer Reaktionen sein können. Weiter ist Γ der Diffusionskoeffizient in der jeweiligen Erhaltungsgleichung, wie z.B. die kinematische Zähigkeit in der Impulserhaltungsgleichung oder die Temperaturleitzahl in der Energieerhaltungsgleichung in Temperaturform. Eine detaillierte Beschreibung der Transportgleichung findet sich in Hinze [19].

3.2 Turbulente Strömungen

Die im Abschnitt 3.1 dargestellten Erhaltungsgleichungen von Masse Gl. (3.1), Impuls Gl. (3.2), Gesamtenergie Gl. (3.4), und chemischer Spezies Gl. (3.10) sind nach heutigem Wissensstand für alle Strömungssituationen von Kontinua gültig, da alle experimentellen Befunde diese bisher bestätigen konnten. Daher muss es möglich sein, auch turbulente Strömungen durch die Erhaltungsgleichungen korrekt zu beschreiben. In der Mehrheit der relevanten Strömungen – in technischen Anwendungen, aber auch in der Natur – handelt es sich um turbulente Strömungen.

gen, die durch stochastische Schwankungen der Strömungsgrößen wie Druck, Geschwindigkeit, Temperatur etc. gekennzeichnet sind. Um festzustellen ob, eine laminare oder turbulente Strömung vorliegt, wird die Reynolds-Zahl Re betrachtet, die das Verhältnis von Trägheitskräften zu Zähigkeitskräften durch die Beziehung [9]

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (3.13)$$

angibt. Hier ist U die charakteristische Geschwindigkeit, L die charakteristische Länge und ν die kinematische Viskosität. Liegt die für die betreffende Strömungssituation bestimmte Reynolds-Zahl unter dem problemspezifischen kritischen Wert der Reynolds-Zahl Re_{krit} , so liegt mit Sicherheit laminare Strömung vor. Ist die Reynolds-Zahl jedoch größer als der kritische Wert Re_{krit} , so wird die Strömung begründet durch Störungen, die nicht abklingen sondern angefacht werden, in turbulente Strömung umschlagen. Den Beweis dafür, dass laminare in turbulente Strömungen umschlagen können, lieferte Osborne Reynolds (1883) durch seinen Farbfadenversuch [9].

3.2.1 Charakteristische Eigenschaften turbulenter Strömungen

- Wesentliches Merkmal turbulenter Strömungen sind regellose Schwankungsbewegungen, welche die Mittelwerte der Strömungsgrößen überlagern. Die Fluktuationen werden als statistisch zufällig aufgefasst.
- Prinzipiell erstrecken sich die zufälligen Schwankungsbewegungen in drei Raumrichtungen, weshalb bei Reduzierung des Strömungsproblems auf zwei Dimensionen die turbulenten Effekte nicht richtig wiedergegeben werden können. Aus diesem und dem oben genannten Grund ist die turbulente Strömung immer eine dreidimensionale und instationäre Erscheinung.
- Grundsätzlich ist die Turbulenz immer eine wirbelbehaftete Bewegung, die i.d.R. bei höheren Reynolds-Zahlen auftritt und ein breites Spektrum von Wirbelabmessungen und Schwankungsfrequenzen abdeckt.

- Die Größe der Wirbel gibt Aufschluss über die Frequenz, wobei große Wirbel kleine Frequenzen haben und ihre Ausdehnungen die gleiche Größenordnung wie die Abmessungen des Strömungsgebietes haben können. Deshalb sind sie wesentlich durch die gesetzten Randbedingungen beeinflusst. Kleinere Wirbel hingegen besitzen höhere Frequenzen und werden stark durch die Zähigkeit dominiert.
- Weil die turbulenten Schwankungsbewegungen um Größenordnungen höher sind als die molekularen Bewegungen, kann es zu einer erheblichen Intensivierung von Mischungsvorgängen, Reibungskräften, oder Wärmeübertragungsvorgängen kommen.
- Da die großen Wirbel in Wechselwirkung mit der Grundströmung stehen, können diese Wirbelstrukturen – im Gegensatz zu den kleinen, isotropen Wirbeln – gerichtet sein und somit Anisotropie aufweisen.
- Große, energiereiche Fluidballen geben Energie an immer kleinere Wirbelstrukturen ab, bis die Viskosität bedeutend wird und Energie irreversibel dissipiert. Mit der Abnahme der Längenskalen geht die Abnahme der Energie einher.
- Bei technischen Problemstellungen mit turbulenten Strömungen ist die Erkenntnis wichtig, dass aufgrund der turbulenten Erscheinungen sich das Niveau der diffusen Vorgänge um einige Größenordnungen gegenüber laminaren Strömungen erhöhen kann.
- Bei Rohrströmungen wird ein Anstieg des Druckverlustes von laminarer Strömung, in welcher der Druckverlust proportional dem Durchfluss ist, hin zu turbulenter Strömung, in welcher der Druckverlust proportional dem Quadrat des Durchflusses ist, verzeichnet.

Detaillierte Beschreibungen der turbulenten Strömungen finden sich in Launder und Spalding [23]. In seiner Diplomarbeit am Institut für Strömungslehre und

Wärmeübertragung hat auch Ablinger Details zu turbulenten Strömungsvorgängen ausgeführt [1].

3.2.2 Mathematische Formulierung turbulenter Strömungen

Turbulente Strömungen, die durch regellose Schwankungen der Strömungsgrößen charakterisiert sind, können mittels mathematischer Methoden beschrieben werden, in denen die Strömungsgrößen als statistisch schwankende Zufallsvariablen angesehen werden. In der mathematischen Formulierung werden die Momentanwerte der Größen $g_i(x_j, t)$ im Strömungsgebiet in einen statistischen Mittelwert und einen Schwankungsanteil zerlegt [44]. Dieser Ansatz wird Reynolds-Zerlegung genannt.

$$g_i(x_j, t) = \langle g_i(x_j, t) \rangle + g_i'(x_j, t) \quad (3.14)$$

3.2.2.1 Die Reynolds-Mittelung

Die Reynolds-Mittelwerte der Strömungsgrößen werden berechnet, indem man den Strömungsvorgang n mal durchführt und jedes Mal zur gleichen Zeit t und am selben Ort x_j die gesuchten Größen ermittelt.

$$\langle g_i(x_j, t) \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g_i^{(k)}(x_j, t) \quad (3.15)$$

Wichtig ist die Unterscheidung von turbulenten Strömungen mit statistisch stationärem Mittelwert von jenen mit statistisch instationärem Mittelwert, da letztere zeitabhängig sind und nicht durch einen konstanten zeitlichen Mittelwert ersetzt werden können (siehe Abbildung 3).

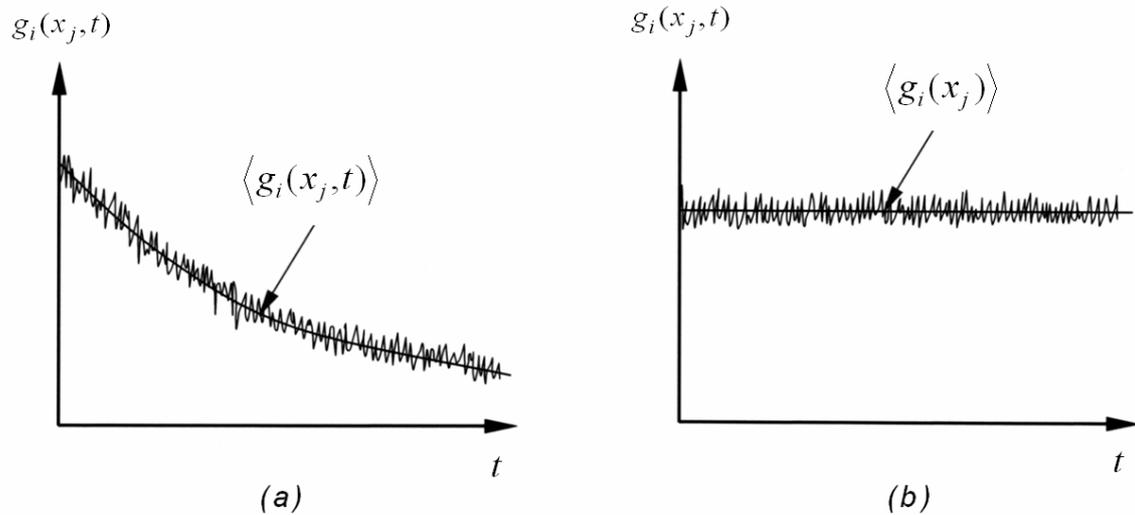


Abbildung 3: (a) Statistisch instationäre Strömung, (b) statistisch stationäre Strömung [1].

Im Falle statistisch stationärer Strömung ist der Ensemble-Mittelwert zeitunabhängig und kann daher durch den zeitlichen Mittelwert ersetzt werden

$$\langle g_i(x_j) \rangle = \bar{g}_i(x_j). \quad (3.16)$$

Wird in weiterer Folge von inkompressibler Strömung mit den Geschwindigkeitskomponenten u_i und dem Druck p ausgegangen, die durch die Reynolds-Zerlegung mit

$$u_i = \bar{u}_i + u_i' \quad (3.17)$$

und

$$p_i = \bar{p}_i + p_i' \quad (3.18)$$

angesetzt werden, so berechnet sich der zeitliche Mittelwert beispielsweise für die Geschwindigkeitskomponenten u_i durch den Ausdruck

$$\bar{u}_i = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} u_i dt. \quad (3.19)$$

$T \rightarrow \infty$ bedeutet in der Praxis, dass T groß sein soll im Vergleich zur typischen Zeitskala der turbulenten Schwankungen. Aus den Eigenschaften des in Gl. (3.19) vorkommenden Integrals ergeben sich die Rechenregeln für die Mittelwerte der turbulenten Schwankungsgrößen. Es gilt

$$\overline{u'_i} = 0. \quad (3.20)$$

Hingegen ist der zeitliche Mittelwert des Produkts zweier Schwankungsgrößen u'_i und u'_j in der Regel nicht gleich null; es gilt also

$$\overline{u'_i u'_j} \neq 0. \quad (3.21)$$

3.2.3 Reynolds-gemittelte Navier-Stokessche Gleichungen

Die direkte Lösung der Erhaltungsgleichungen für technisch relevante turbulente Strömungssituationen, die häufig durch komplexe Geometrie und hohe Reynolds-Zahlen charakterisiert sind, mit Einbezug aller auftretenden örtlichen und zeitlichen Skalen, ist mit heutigen und in naher Zukunft zur Verfügung stehenden Rechenleistungen wirtschaftlich und zeitlich unmöglich. Eine exakte Auflösung ist in vielen technischen Problemstellungen aber auch nicht erforderlich, da meist zeitliche und örtliche Mittelwerte turbulenter Strömungsgrößen für die Beantwortung von Fragestellungen in Bezug auf Wärmeübergang, Druckverlust oder Reibungskraft ausreichen. Dies wird für inkompressible Strömungen durch die Reynolds-Mittelung erreicht, die auf die Navier-Stokesschen Gleichungen angewandt wird. Die hierbei auftretenden zusätzlichen Spannungsterme müssen allerdings mit Hilfe von Turbulenzmodellen modelliert werden.

Mit Einführung der in Abschnitt 3.2.2 aufgezeigten Zusammenhänge für die Reynolds-Mittelung und nach einigen Umformungen lauten unter Vernachlässigung der volumenspezifischen Kräfte die Erhaltungsgleichungen inkompressibler Fluide für Masse Gl. (3.22) und Impuls Gl. (3.23) [3].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\bar{u}_i\bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial\bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial\rho\overline{u'_i u'_j}}{\partial x_j} \quad (3.23)$$

Aus der Reynolds-gemittelten Erhaltungsgleichung für den Impuls Gl. (3.23) (den Reynolds-averaged Navier-Stokes equations – RANS) ist ersichtlich, dass sich diese von der Impulsgleichung für die Momentanwerte Gl. (3.2) ohne volumenspezifische Kräfte nur durch den letzten Term, die Divergenz des Tensors $\rho\overline{u'_i u'_j}$, unterscheidet. Dieser Term wird als Reynoldsscher Spannungstensor bezeichnet, der als Formulierung zusätzlicher, scheinbarer Spannungen aufgrund der Trägheitswirkung der turbulenten Schwankungsbewegungen aufgefasst werden kann. Wird die Reynoldssche Mittelung auf die Energiegleichung angewandt, so ergibt sich unter Vernachlässigung der Dissipation und innerer Wärmequellen für inkompressible Fluide formuliert in Temperaturform [30]

$$\rho c_p \bar{u}_j \frac{\partial\bar{T}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial\bar{T}}{\partial x_j} - \rho c_p \overline{u'_j T'} \right). \quad (3.24)$$

Durch die Reynolds-Mittelung kommt die Divergenz des Tensors $\rho c_p \overline{u'_j T'}$ hinzu. Dieser Term entspricht sinngemäß einem turbulenten Wärmestrom. Im Falle kompressibler Strömungen können die Reynolds-gemittelten Erhaltungsgleichungen (3.22), (3.23) und (3.24) als Favre-gemittelte Navier-Stokessche Gleichungen mit dichtegemittelten Geschwindigkeiten angesetzt werden [3]. Detaillierte Darstellungen der Reynolds- und Favre-gemittelten Navier-Stokesschen Gleichungen finden sich in Hinze [19] und Blazek [6]. Unter der Voraussetzung, dass

$$\frac{\rho'}{\bar{\rho}} \ll 1 \quad (3.25)$$

können die kompressiblen Effekte der turbulenten Schwankungsbewegungen vernachlässigt werden [19]. In den Abschnitten 3.2.4 und 3.2.5 wird zur Beschreibung der turbulenten Spannungen und der Turbulenzmodelle der Einfluss der Kompressibilität vernachlässigt unter der Annahme, dass geringe Dichteschwankungen im

Sinn von Gl. (3.25) auftreten. In diesem Zusammenhang ist auch die Hypothese von Morkovin (1964) von Wichtigkeit, die besagt, dass die Einflüsse der Dichteschwankungen auf die Turbulenzstruktur für Machzahlen bis fünf in Grenzschichtströmungen und Nachlaufdüsen nur gering sind. Dies bedeutet, dass Turbulenzmodelle, die auf experimentellen Daten inkompressibler Strömungen basieren, in diesem Bereich noch Gültigkeit haben.

3.2.4 Schließungsproblem

Aus Abschnitt 3.2.3 wurde ersichtlich, dass die Reynolds-gemittelten Navier-Stokesschen Gleichungen (3.22) und (3.23) formell nur durch den letzten Term in der Impulsgleichung von den Momentanwerten der Navier-Stokesschen Gleichungen (3.1) und (3.2) verschieden sind. Der als Reynoldsscher Spannungstensor bekannte Term bringt, bedingt durch seine Symmetrieeigenschaften, sechs neue Unbekannte hervor

$$\overline{\rho u'_i u'_j} = \begin{bmatrix} \overline{\rho u'^2} & \overline{\rho u'v'} & \overline{\rho u'w'} \\ \overline{\rho v'u'} & \overline{\rho v'^2} & \overline{\rho v'w'} \\ \overline{\rho w'u'} & \overline{\rho w'v'} & \overline{\rho w'^2} \end{bmatrix}, \quad (3.26)$$

die zu einem nicht geschlossenen Gleichungssystem führen. Aus physikalischer Sicht werden die scheinbaren turbulenten Spannungen aufgrund der turbulenten Schwankungen durch Impulsaustausch auf makroskopischer Ebene hervorgerufen. Wenn die zu beschreibende Strömungssituation durch Wärmeübertragungsvorgänge beeinflusst wird, wie es in der vorliegenden Arbeit der Fall ist, so muss zusätzlich die Energiegleichung mit berücksichtigt werden. Durch die Reynolds-gemittelte Energiegleichung (3.24) entstehen aufgrund des Terms $c_p \overline{\rho u'_j T'}$ noch drei weitere Unbekannte. Um das Gleichungssystem lösen zu können, müssen die Terme $\overline{\rho u'_i u'_j}$ und $c_p \overline{\rho u'_j T'}$ durch geeignete Ansätze modelliert werden. Diese Problematik wird als Schließungsproblem bezeichnet.

3.2.5 Simulation turbulenter Strömungen

3.2.5.1 Direkte Numerische Simulation (DNS)

Exakte Lösungen der Navier-Stokesschen Gleichungen ermöglicht die Direkte Numerische Simulation (DNS), die alle relevanten Strömungsphänomene einer turbulenten Strömung erfasst. Dies erfordert einerseits eine hohe Auflösung des Rechennetzes, das alle physikalischen Längenmaßstäbe erfassen muss, und andererseits eine geringe Zeitschrittweite, um auch die zeitliche Auflösung der turbulenten Vorgänge zu gewährleisten. Somit sind weder zeitliche noch räumliche Mittelungen erforderlich, und folglich auch keine Modellierung zusätzlicher unbekannter Größen. Da die Direkte Numerische Simulation ohne Modellierung der Turbulenz auskommt, ist sie grundsätzlich das einfachste und physikalisch richtigste Konzept zur Strömungssimulation. Die einzige Approximation wird durch die räumliche und zeitliche Diskretisierung der Erhaltungssätze hervorgerufen [45].

Für die meisten ingenieurmäßigen Aufgabenstellungen, die hohe Reynolds-Zahlen aufweisen, ist die exakte Lösung der Navier-Stokesschen Gleichungen bei weitem zu aufwendig. Dies begründet sich durch die hohen räumlichen und zeitlichen Auflösungsansprüche. Dennoch wird die Direkte Numerische Simulation bei einfacher Geometrie und niedrigen Reynolds-Zahlen in der Forschung eingesetzt, um detaillierteste Informationen des turbulenten Strömungsverhalten zu bekommen und dadurch die zugrundeliegenden Mechanismen von Produktion, Transport und Dissipation turbulenter kinetischer Energie zu verstehen und Turbulenzmodelle zu validieren.

3.2.5.2 Large Eddy Simulation (LES)

Die Large Eddy Simulation basiert auf einem wesentlich gröberen Rechengitter als die Direkte Numerische Simulation, ist aber gegenüber Simulationen, die auf den Reynolds-Gleichungen basieren, wesentlich genauer. In diesem Modell werden nur die großen Wirbel numerisch aufgelöst. Die kleinen Wirbel, die wesentlich isentroper und damit einfacher zu modellieren sind als die großen Wirbelstrukturen, werden durch entsprechende Turbulenzmodelle berücksichtigt (sub-grid-scale models). Prinzipiell löst die Large Eddy Simulation räumlich gefilterte Transportgleichungen für die relevanten Strömungsgrößen [45]. Der Rechenaufwand, der sich durch die Large Eddy Simulation ergibt, ist zwar immer noch beträchtlich,

aber im Vergleich zur Direkten Numerischen Simulation akzeptabel und wird häufig in Kauf genommen, wo instationäre Vorgänge von Bedeutung sind.

3.2.5.3 Wirbelviskositätsmodelle

Die Wirbelviskositätsmodelle, zu denen Null-, Ein- und Zweigleichungsmodelle zählen, reichen von einfachen algebraischen Ansätzen wie dem Prandtlschen Mischungswegansatz (1925) bis zu aufwändigen Turbulenzmodellen, in denen für die unbekanntenen Größen zusätzliche Transportgleichungen gelöst werden müssen. In Abbildung 4 ist eine Übersicht zur möglichen Simulation turbulenter Strömungen dargestellt.

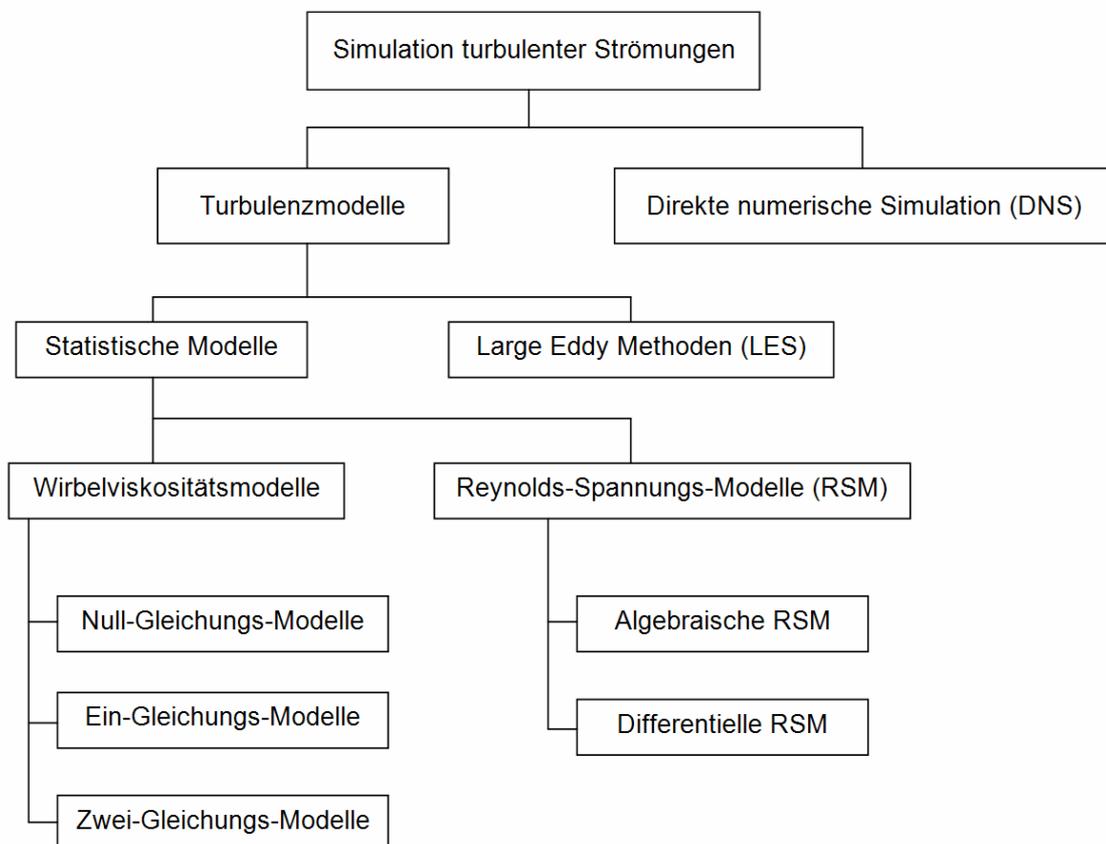


Abbildung 4: Übersicht der Simulationsmöglichkeiten für turbulente Strömungen [26].

Die Wirbelviskositätsmodelle basieren auf einem Ansatz von Boussinesq (1877), in dem die scheinbaren turbulenten Spannungen durch Einführung der Wirbelviskosität μ_t in Anlehnung an den Ansatz zur Berechnung der viskosen Spannungen nach Gl. (3.3) ermittelt werden. Der Ansatz zur Berechnung der turbulenten Spannungen in den Reynolds-gemittelten Erhaltungsgleichungen lautet [6]:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (3.27)$$

Es wird hier noch darauf hingewiesen, dass die eingeführte Wirbelviskosität μ_t im Gegensatz zur dynamischen Viskosität μ viskoser Fluide keine Stoffgröße ist, sondern eine strömungsbedingte charakteristische Größe darstellt, die sowohl vom Ort, als auch von der Geschwindigkeit im Strömungsfeld abhängt. Das Schließungsproblem der Reynolds-gemittelten Navier-Stokesschen Gleichungen reduziert sich daher bei Modellen, die den Ansatz von Boussinesq beinhalten, auf die Bestimmung der Wirbelviskosität μ_t . Die im Ansatz für die Berechnung der turbulenten Spannungen nach Gl. (3.27) auftretende turbulente kinetische Energie k gibt Aufschluss über die Turbulenzintensität der turbulenten Strömung durch den Zusammenhang [6]

$$k = \frac{1}{2} \left(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2} \right). \quad (3.28)$$

3.2.5.4 Standard k, ε -Modell

In diesem Abschnitt wird auf das Standard k, ε -Modell von Launder und Spalding [23] eingegangen, das zu den Zweigleichungsmodellen zählt und wohl am häufigsten in technischen Anwendungen eingesetzt wird. Die weite Verbreitung dieses Modells für industrielle Strömungs- und Wärmeübertragungs-Simulationen erklärt sich durch seine Robustheit, Wirtschaftlichkeit und angemessene Genauigkeit für eine Vielzahl turbulenter Strömungen.

Das Standard k, ε -Modell löst zusätzlich zu den RANS-Gleichungen zwei weitere Transportgleichungen, eine für die turbulente kinetische Energie k , und eine für die turbulente Dissipation ε . Dieses Konzept bildet ein semi-empirisches Modell, das auf phänomenologischen und empirischen Erkenntnissen beruht. Nachdem spezifische Stärken und Schwächen des Standard k, ε -Modells erkannt wurden, führten Weiterentwicklungen zum RNG (Re-Normalisation Group) k, ε -Modell von Yakhot und Orszag, und zum Realizable k, ε -Modell von Shih et al. [43], das in

der vorliegenden Arbeit eingesetzt wurde und im Abschnitt 3.2.5.5 genauer angesprochen wird.

Die Transportgleichungen des Standard k, ε -Modells für die turbulente kinetische Energie k und für die turbulente Dissipation ε lauten [3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon u_j) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \end{aligned} \quad (3.30)$$

Die ersten Terme links in Gl. (3.29) und Gl. (3.30) geben die lokale Änderung von k und ε wieder, die zweiten Terme in den Transportgleichungen (3.29) und (3.30) stellen die konvektive Änderung von k und ε dar. Die ersten Terme rechts in den Gl. (3.29) und (3.30) beschreiben den Transport von k und ε aufgrund molekularer Diffusion und der Diffusion durch turbulente und druckbedingte Fluktuationen. Die Größe G_k repräsentiert die Produktion von turbulenter kinetischer Energie aufgrund der Gradienten der gemittelten Geschwindigkeiten.

$$G_k = -\overline{\rho u'_i u'_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (3.31)$$

Der dritte Term auf der rechten Seite der Gl. (3.29), G_b , steht für die Generierung der turbulenten kinetischen Energie, basierend auf Effekten der Auftriebskraft, die immer dann in Erscheinung treten, wenn Strömungen einem Gravitationsfeld und Temperaturgradienten ausgesetzt sind. G_b ist gegeben durch

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (3.32)$$

wobei Pr_t die turbulente Prandtl-Zahl und g_i die Komponente des Massenkraftdichtevektors in der kartesischen Raumrichtung i sind. Der thermische Ausdehnungskoeffizient β ist gegeben durch die Beziehung

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p. \quad (3.33)$$

Y_M berücksichtigt den Anteil der schwankenden Dilatation in kompressibler Turbulenz an der gesamten Dissipationsrate. Bei turbulenten Strömungen mit hohen Mach-Zahlen wird die Turbulenz durch die starke Kompressibilität des Fluids mit Effekten der sogenannten „Dilatations-Dissipation“ beeinflusst, die bei inkompressiblen Strömungen vernachlässigt wird. Dies wird von Wilcox [35] zitiert von Fluent Theory Guide [3] wie folgt dargestellt

$$Y_M = 2\rho\varepsilon M_t^2, \quad (3.34)$$

hierin ist M_t die turbulente Mach-Zahl, die definiert ist als

$$M_t = \sqrt{\frac{k}{a^2}}. \quad (3.35)$$

a ist die lokale Schallgeschwindigkeit des Fluids. Die turbulente Viskosität μ_t ist abhängig von der turbulenten kinetischen Energie k und der turbulenten Dissipation ε und berechnet sich nach folgendem Zusammenhang

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (3.36)$$

S_k und S_ε stellen zusätzliche Quellterme dar, die problemspezifisch vorgegeben werden können. Von den Termen wurde in dieser Arbeit kein Gebrauch gemacht. Folgende Werte der Konstanten $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, σ_k und σ_ε , denen experimentelle Messungen von Launder und Spalding [23] zugrunde liegen, haben sich durchgesetzt

$$\begin{aligned} C_{1\varepsilon} &= 1.44, \quad C_{2\varepsilon} = 1.92, \quad C_\mu = 0.09, \\ \sigma_k &= 1.0, \quad \sigma_\varepsilon = 1.3. \end{aligned} \tag{3.37}$$

Die Konstanten σ_k und σ_ε , werden als turbulente Prandtl-Zahlen für k und ε bezeichnet. Der Wert von $C_{3\varepsilon}$ repräsentiert den Einfluss des Auftriebes auf ε und berechnet sich nach folgender Beziehung

$$C_{3\varepsilon} = \tanh\left|\frac{v}{u}\right|. \tag{3.38}$$

Hier ist v die Geschwindigkeitskomponente parallel zum Gravitationsvektor und u ist jene Komponente der Strömungsgeschwindigkeit, die normal zum Gravitationsfeld zeigt. Das bedeutet, dass $C_{3\varepsilon}$ den Wert 1 erreicht für Strömungen, deren Hauptströmungsrichtung mit der Richtung des Gravitationsfeldes übereinstimmt. Das Standard k, ε -Modell gründet auf der Annahme konstanter Wirbelviskosität für alle Reynoldsschen Spannungen, wodurch sich bei Strömungssituationen mit Ablösungserscheinungen, rotierenden Strömungen, Strömungen entlang stark gekrümmter Wände u.a. teils erhebliche Abweichungen vom realen Strömungsverhalten ergeben können. Dieses Turbulenzmodell wurde unter der Voraussetzung hoher Reynolds-Zahlen hergeleitet und ist daher nur im voll turbulenten Strömungsgebiet gültig. Für den wandnahen Bereich können z.B. Wandfunktionen in Verbindung mit dem Turbulenzmodell zum Einsatz kommen oder sogenannte „Low-Reynolds-Number“ Modelle verwendet werden.

3.2.5.5 Realizable k, ε -Modell

Das Realizable k, ε -Modell von Shih et al. [43] unterscheidet sich vom Standard k, ε -Modell durch Einführung einer neuen Transportgleichung für die turbulente Dissipation ε und einer neuen Definition der turbulenten Viskosität μ_t . Einer der wesentlichen Vorteile des Realizable k, ε -Modells gegenüber dem Standard k, ε -Modell ist, dass es die Ausbreitung von ebenen und rotationssymmetrischen Strahlen exakter beschreibt. Ferner können bei diesem Turbulenzmodell bessere Ergebnisse für rotierende Strömungen, Strömungen die gegen einen hohen Druckgradienten in der Grenzschicht anrennen, und für Rückströmungen erwartet werden [3].

Das Realizable k, ε -Modell wurde für einen breiten Anwendungsbereich für Strömungen validiert: für rotierende, homogene Scherströmungen, Kanal- und Grenzschichtströmungen, sowie für Freistrahlen. Für alle diese Fälle wurden wesentlich bessere Ergebnisse erzielt als mit dem Standard k, ε -Modell [43]. Aufgrund dieser Vorteile wurde in der vorliegenden Arbeit das Realizable k, ε -Modell eingesetzt. Dem Realizable k, ε -Modell liegen folgende Transportgleichungen für k und ε zugrunde [3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon u_j) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_{1\varepsilon} S \varepsilon - \rho C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} \\ &+ C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b + S_\varepsilon \end{aligned} \quad (3.40)$$

In diesen Gleichungen ist G_k die Produktion turbulenter kinetischer Energie k (siehe Gl. (3.31)), und G_b steht für die Produktion turbulenter kinetischer Energie k aufgrund von Auftriebskräften (siehe Gl. (3.32)). Y_M berücksichtigt den Anteil der schwankenden Dilatation in kompressibler Turbulenz an der gesamten Dissipationsrate (siehe Gl. (3.34)). C_2 und $C_{1\varepsilon}$ sind Konstanten des Turbulenzmodells. Auch σ_k und σ_ε sind Konstanten, die als turbulente Prandtl-Zahlen für k und ε bezeichnet werden. S_k und S_ε stellen zusätzliche problemrelevante Quellterme dar, die in dieser Arbeit aber nicht berücksichtigt werden.

Die Transportgleichung für k Gl. (3.39) ist identisch mit der des Standard k, ε -Modells Gl. (3.29). Die Transportgleichung für ε , Gl. (3.40), unterscheidet sich dagegen einerseits durch den zweiten Term auf der rechten Seite der Gleichung, der die Produktion von k nicht beinhaltet, und andererseits durch den Zerstörungsterm, welcher der dritte Term auf der rechten Seite ist, der keine Singularität aufweist. Dieser Aspekt steht im Gegensatz zum traditionellen k, ε -Modell, wo Singularität durch Verschwinden von k entstehen kann, wodurch dort nicht realisierbare Ergebnisse auftreten können.

$$C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right],$$

$$\eta = S \frac{k}{\varepsilon},$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}.$$
(3.41)

Ein weiterer Unterschied zum Standard k, ε -Modell ist, dass C_μ nicht mehr als konstant angesetzt wird, sondern nach folgender Beziehung ermittelt wird

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{kU^*}{\varepsilon}},$$
(3.42)

wobei

$$U^* \equiv \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij}\tilde{\Omega}_{ij}} \quad (3.43)$$

und

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}_{ij} &= \Omega_{ij} - 2\varepsilon_{ijk}\omega_k, \\ \bar{\Omega}_{ij} &= \tilde{\Omega}_{ij} - \varepsilon_{ijk}\omega_k. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Der Ausdruck $\bar{\Omega}_{ij}$ ist der gemittelte Rotationsraten-Tensor, betrachtet in einem mit der Winkelgeschwindigkeit ω_k rotierenden Bezugssystem. Die Modell-Konstanten A_0 und A_S sind gegeben durch

$$\begin{aligned} A_0 &= 4.4, \\ A_S &= \sqrt{6} \cos \phi. \end{aligned} \quad (3.45)$$

mit

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{1}{3} \cos^{-1}(\sqrt{6} W), \\ W &= \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{\tilde{S}^3}, \\ \tilde{S} &= \sqrt{S_{ij}S_{ij}}, \\ S_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right). \end{aligned} \quad (3.46)$$

In diesem Turbulenzmodell ist C_μ von den gemittelten Scher- und Rotationsraten, der Winkelgeschwindigkeit, sowie von k und ε abhängig (Gl. (3.42)). Für die übrigen Konstanten gelten die Werte

$$\begin{aligned} C_{1\varepsilon} &= 1.44, \quad C_2 = 1.9, \\ \sigma_k &= 1.0, \quad \sigma_\varepsilon = 1.2. \end{aligned} \tag{3.47}$$

Alle k, ε -Modelle haben jedoch den Nachteil, dass sie die auftretenden Reynoldsschen Spannungen in den Reynolds-gemittelten Navier-Stokesschen Gleichungen nicht korrekt wiedergeben, was jedoch für bestimmte Strömungssituationen relevant ist. Dies gilt vor allem dann, wenn anisotrope Turbulenz auftritt. Das k, ε -Modell geht grundsätzlich von isotroper Turbulenz aus. Dieser mangelhaften Darstellung der Natur turbulenter Strömungen wird von Turbulenzmodellen zweiter Ordnung entgegengewirkt, indem sie für jede Unbekannte der Reynoldsschen Spannungen eine eigene Transportgleichung lösen.

3.2.5.6 Das Reynoldssche Spannungsmodell (RSM)

Das Reynoldssche Spannungsmodell schließt die Reynolds-gemittelten Navier-Stokesschen Gleichungen dadurch, dass für jede der sechs Unbekannten (im dreidimensionalen Fall) des Reynoldsschen Spannungstensors und für die Dissipationsrate je eine Transportgleichung gelöst wird. Das Reynoldssche Spannungsmodell ist grundsätzlich in der Lage, komplexe Strömungssituationen wie drallbehaftete und rotierende Strömungen, Strömungen entlang stark gekrümmter Wände, und Strahl-Wand-Interaktionen genauer abzubilden als die k, ε -Modelle. Durch die höhere Anzahl der zu lösenden Gleichungen steigt aber naturgemäß auch der Rechenaufwand. Außerdem zeigt die Praxis, dass Konvergenzschwierigkeiten tendenziell häufiger mit dem RSM in Erscheinung treten als bei einfacheren Turbulenzmodellen. Im Folgenden wird die exakte Transportgleichung der Reynoldsschen Spannungen $\overline{\rho u'_i u'_j}$ aufgezeigt, ohne im Detail auf die Modellierung bestimmter Terme einzugehen. Die Transportgleichung stellt sich folgendermaßen dar [3]:

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho u'_i u'_j})}_I + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho u_k u'_i u'_j})}_{II} = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}[\overline{\rho u'_i u'_j u'_k} + p(\delta_{kj} u'_i + \delta_{ik} u'_j)]}_{III} \\
 & + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_i u'_j}) \right]}_{IV} - \underbrace{\rho \left(\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)}_V \\
 & - \underbrace{\rho \beta (g_i \overline{u'_j \Theta} + g_j \overline{u'_i \Theta})}_{VI} + \underbrace{p \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)}_{VII} - \underbrace{2\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}}_{VIII} \\
 & - \underbrace{2\rho \Omega_k (\overline{u'_j u'_m} \varepsilon_{ikm} + \overline{u'_i u'_m} \varepsilon_{jkm})}_{IX} + \underbrace{S_{user}}_X
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

Term *I* und *II* sind die lokalen, zeitlichen Änderungen und die konvektionsbedingten Änderungen der Reynoldsschen Spannungen. Term *III* und *IV* geben den Transport der Reynoldsschen Spannungen aufgrund turbulenter und molekularer Diffusion an. Der Term *V* in obiger Gleichung berücksichtigt den wesentlichen Teil der Produktion der Reynoldsschen Spannungen, und der Term *VI* ist ebenfalls eine Produktion der Reynoldsschen Spannungen basierend auf Auftriebseffekten. Der Term *VII* ist der Druckterm, und Term *VIII* bildet dissipative Effekte in der Transportgleichung ab. Der Term *IX* gibt die Produktion durch die Rotation des Systems mit Ω_k an, und der letzte Term *X* in der exakten Transportgleichung ermöglicht benutzerspezifische Vorgaben durch beliebige Quellterme.

Für eine ausführliche Beschreibung der auftretenden Terme, sowie die Modellierung der turbulenten Diffusion, der Produktion aufgrund von Auftriebseffekten, des Druckterms, und der Dissipation wird auf Basara [4] und Fluent Theory Guide [3] verwiesen.

3.3 Grenzschichten

Strömungsfelder, in denen Grenzschichtströmungen ausgebildet werden sind dadurch gekennzeichnet, dass die Strömung in einem bestimmten Gebiet, der sogenannten Grenzschicht, von der Geschwindigkeit der Außenströmung am Grenz-

schichtrand, bis auf die Geschwindigkeit null an der Wand (Erfüllung der Haftbedingung) abgebremst wird. Grenzschichten existieren aber auch für die Temperatur und für Massenanteile von Gemischkomponenten.

3.3.1 Geschwindigkeitsgrenzschicht

Prinzipiell liegt dem Grenzschichtmodell die Annahme zugrunde, dass sich die viskosen Kräfte nur in einer sehr dünnen Schicht in der Nähe der Begrenzung auswirken, wenn ein Strömungsvorgang mit hoher Reynolds-Zahl, die definitionsgemäß das Verhältnis von Trägheitskräften zu Zähigkeitskräften angibt, vorliegt. Theoretisch wird die Geschwindigkeit der Außenströmung erst in unendlichem Abstand von der Wand erreicht. In der Praxis geht man davon aus, dass der Grenzschichttrand dort liegt, wo die Strömungsgeschwindigkeit 99% der Geschwindigkeit der Außenströmung erreicht hat [9].

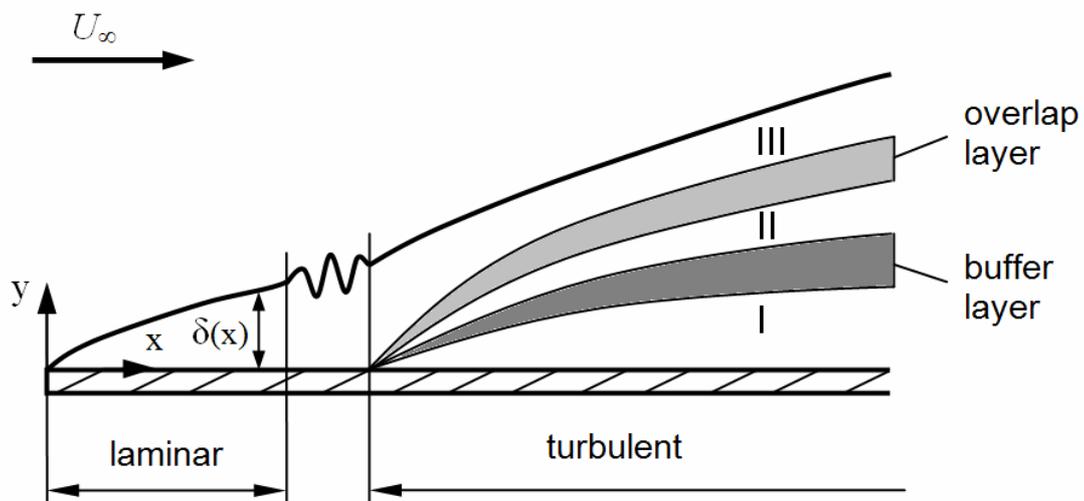


Abbildung 5: Aufbau der Grenzschicht an einer parallel angeströmten ebenen Platte [9].

Betrachtet man die Strömungssituation entlang einer ebenen, mit der Geschwindigkeit U_∞ parallel angeströmten Platte, so ist ersichtlich, dass die Grenzschicht mit der Grenzschichtdicke $\delta(x)$ anfänglich laminaren Charakter aufweist und mit zunehmendem Strömungsweg x allmählich – durch Auftreten von Querbewegungen – instabil wird und in turbulente Strömung umschlägt. Grundsätzlich führt dies zu einem völligeren Geschwindigkeitsprofil, und damit einhergehend zu einem größeren Geschwindigkeitsgradienten an der Wand, was größere Wandschubspannungen und eine Widerstandserhöhung des umströmten Körpers bedeutet.

Durch Betrachtung der laminaren und der turbulenten Schubspannungen (τ_l und τ_t) lässt sich eine Klassifizierung des Gebiets der turbulenten Grenzschicht in drei Bereiche vornehmen (siehe Abbildung 5) [9]:

- I viskose Unterschicht: $\tau_l \gg \tau_t, \tau \approx \tau_l$
- II turbulente Innenschicht: $\tau = \tau_l + \tau_t$
- III turbulente Außenschicht: $\tau_t \gg \tau_l, \tau \approx \tau_t$

Wobei hier schon erwähnt sei, dass das logarithmische Wandgesetz, auf das später noch Bezug genommen wird, nur im Bereich III, der voll turbulenten Außenschicht, Gültigkeit hat. Die Zonen buffer layer und overlap layer zwischen den drei Bereichen sind Übergangsschichten.

3.3.2 Temperaturgrenzschicht

Die Ausbildung einer Grenzschicht ist physikalisch auch für das Temperaturfeld zu erwarten, wenn zusätzlich zum Strömungsvorgang ein Wärmeübertragungsvorgang auftritt. Aus dem bekannten Verlauf der Geschwindigkeit von Fluidströmungen entlang fester Wände kann analog auf den Verlauf von Temperaturprofilen in Temperaturgrenzschichten geschlossen werden. Innerhalb einer dünnen Schicht in der Nähe des Körpers ändert sich die Temperatur deutlich, außerhalb der Temperaturgrenzschicht δ_t bleibt die Temperatur des Fluids praktisch unbeeinflusst.

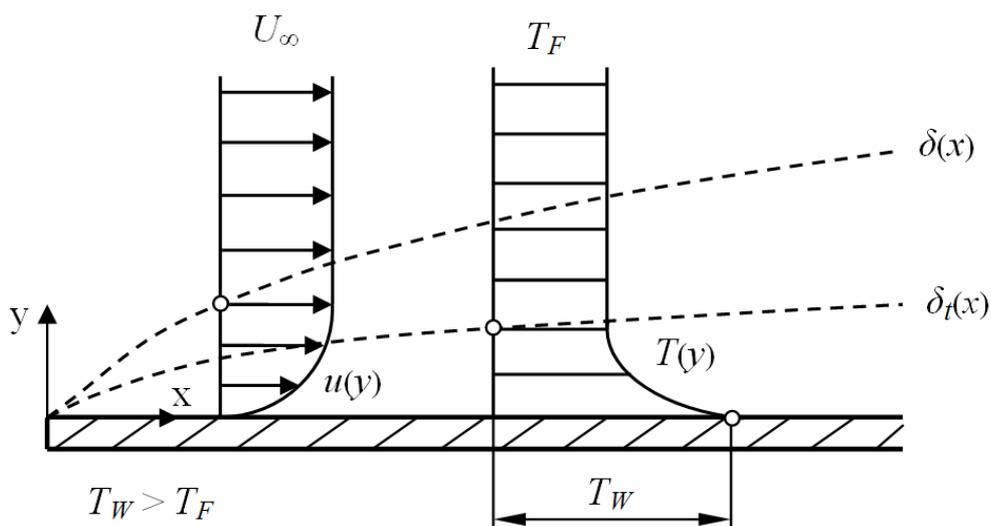


Abbildung 6: Vergleich von Geschwindigkeits- und Temperaturgrenzschicht [9].

Wenn das Geschwindigkeitsfeld vom Temperaturfeld abhängt, so spricht man in diesem Zusammenhang von einer Koppelung des Geschwindigkeits- und des Temperaturfeldes. Eine einfache Art der Beeinflussung des Geschwindigkeitsfeldes durch die Fluidtemperatur findet aufgrund der Temperaturabhängigkeit der Viskosität μ oder der Dichte ρ des Fluids statt. Dies ist vor allem dann von praktischer Bedeutung, wenn große Temperaturunterschiede im Strömungsfeld auftreten. Um eine Abschätzung des Verhältnisses der Dicken von Temperatur- und Strömungsgrenzschicht (δ_t/δ) zu geben, wird die Prandtl-Zahl betrachtet, die physikalisch das Verhältnis der Diffusivitäten von Impuls und Enthalpie bedeutet. Die Prandtl-Zahl ist eine reine Stoffgröße und ist folgendermaßen definiert [9]

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda}. \quad (3.49)$$

Hier ist μ die dynamische Viskosität, c_p die spezifische Wärmekapazität und λ die Wärmeleitfähigkeit des Fluids. Für den Spezialfall inkompressibler Strömung und erzwungener Konvektion (Vernachlässigung des Auftriebsterms) erhält man aus der Grenzschichtnäherung der Impulsgleichung den folgenden Zusammenhang [9]

$$\frac{\delta_t}{\delta} = O\left(\frac{1}{\sqrt{Pr}}\right). \quad (3.50)$$

O steht in dieser Beziehung für die Größenordnung. Abhängig von der Prandtl-Zahl gilt somit für die Geschwindigkeits- und Temperaturgrenzschicht:

- $Pr < 1$: $\delta_t > \delta$;
- $Pr = 1$: $\delta_t = \delta$;
- $Pr > 1$: $\delta_t < \delta$.

Für viele Gase sind die Dicken von Temperatur- und Geschwindigkeitsgrenzschicht in etwa gleich, da näherungsweise gilt: $Pr \approx 1$. Die obigen Betrachtungen gelten für laminare Strömung.

3.3.3 Wandbehandlung für die Turbulenzmodellierung

Die Gültigkeit des in dieser Arbeit verwendeten Realizable k, ε -Modells basiert auf der Annahme hoher Reynolds-Zahlen. Diese Annahme kann jedoch für den wandnahen Bereich nicht zutreffen, da hier viskose Erscheinungen überwiegen. Gerade der wandnahe Bereich bestimmt aber den Strömungswiderstand und auch den Wärmeübertragungsvorgang wesentlich, da die Wand für die Entstehung der Wirbelbewegungen und der Turbulenz einen erheblichen Beitrag leistet. Daher ist es notwendig, in Berechnungen die Vorgänge auch in diesem Bereich physikalisch möglichst treffend wiederzugeben.

Nahe an der festen Begrenzung reduziert die viskose Dämpfung die Fluktuationen in tangentialer Richtung, und auch die Schwankungsbewegungen in Normalrichtung werden unterbunden. Im äußeren Teil des wandnahen Bereichs nimmt die Produktion an turbulenter kinetischer Energie aufgrund der großen Geschwindigkeitsgradienten stark zu [3].

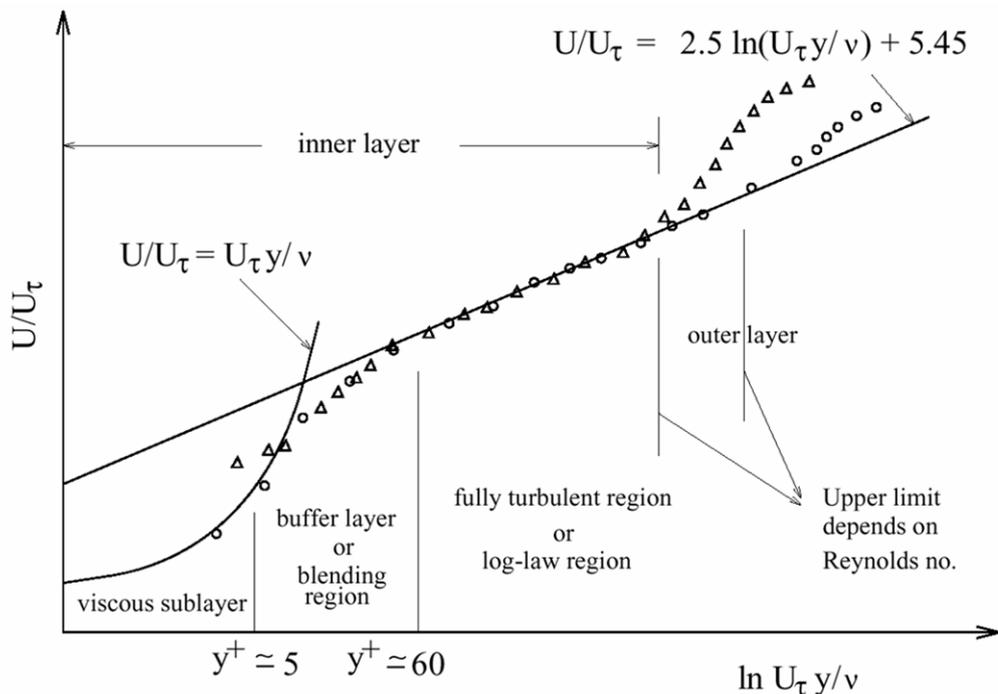


Abbildung 7: Unterteilung des wandnahen Bereichs in Abhängigkeit des dimensionslosen Wandabstandes y^+ [3].

Untersuchungen haben gezeigt, dass der wandnahe Bereich prinzipiell in drei Schichten (inner layer) unterteilt werden kann (Abbildung 7) [3]:

- Die viskose Unterschicht (viscous sublayer), die direkt an der Wand anliegt, in der die viskosen Effekte eine dominante Rolle für die dort stattfindenden

physikalischen Vorgänge, wie beispielsweise Impuls-, Wärme- und Massentransport, spielen.

- Eine voll turbulente Außenschicht (fully turbulent region oder log-law region), in der die Turbulenz die entscheidende Größe ist und das logarithmische Wandgesetz Gültigkeit hat.
- Eine Übergangszone zwischen der viskosen Unterschicht und der voll turbulenten Außenschicht (buffer layer oder blending region), in der sowohl die dynamische Viskosität des Fluids, als auch die Turbulenz mit einbezogen werden müssen.

Hierbei wird der dimensionslose Wandabstand y^+ folgendermaßen definiert

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau y}{\mu}, \quad (3.51)$$

wobei y der Abstand normal zur Wand ist und u_τ die Schubspannungsgeschwindigkeit wie folgt definiert ist

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_W}{\rho}}. \quad (3.52)$$

Das Simulationsprogramm Fluent 12.0, in der die vorliegende Arbeit durchgeführt wurde, verwendet aber noch eine weitere Definition des dimensionslosen Wandabstandes y^* die lautet [3]

$$y^* = \frac{\rho C_\mu^{1/4} k_P^{1/2} y_P}{\mu}, \quad (3.53)$$

in der C_μ eine Konstante des Turbulenzmodells ist, k_P die turbulente kinetische Energie im Zentrum P der wandnächsten Zelle, und y_P der Abstand normal von der Wand zum Zentrum der wandnächsten Zelle.

Grundsätzlich verfügt das verwendete Simulationsprogramm über zwei Möglichkeiten, den wandnahen Bereich zu modellieren. Einerseits durch den sogenannten *Wall Function Approach*, in dem das wandnahe Gebiet nicht numerisch aufgelöst, sondern mit Wandfunktionen überbrückt wird. Andererseits ist eine genauere Berechnung dieses Gebietes mit dem *Near-Wall Model Approach* möglich, in dem das wandnächste Gebiet numerisch aufgelöst wird. Das erfordert naturgemäß sehr hohe Rechenkapazitäten und stößt in der Praxis, für technisch relevante Problemstellungen, sehr schnell an ökonomische Grenzen. Die Verwendung von Wandfunktionen ist für Strömungen mit hohen Reynolds-Zahlen für industrielle Anwendungen häufig ausreichend genau und erfordert weniger Berechnungszeit als die Berechnung mit vollständiger Auflösung des wandnahen Bereichs.

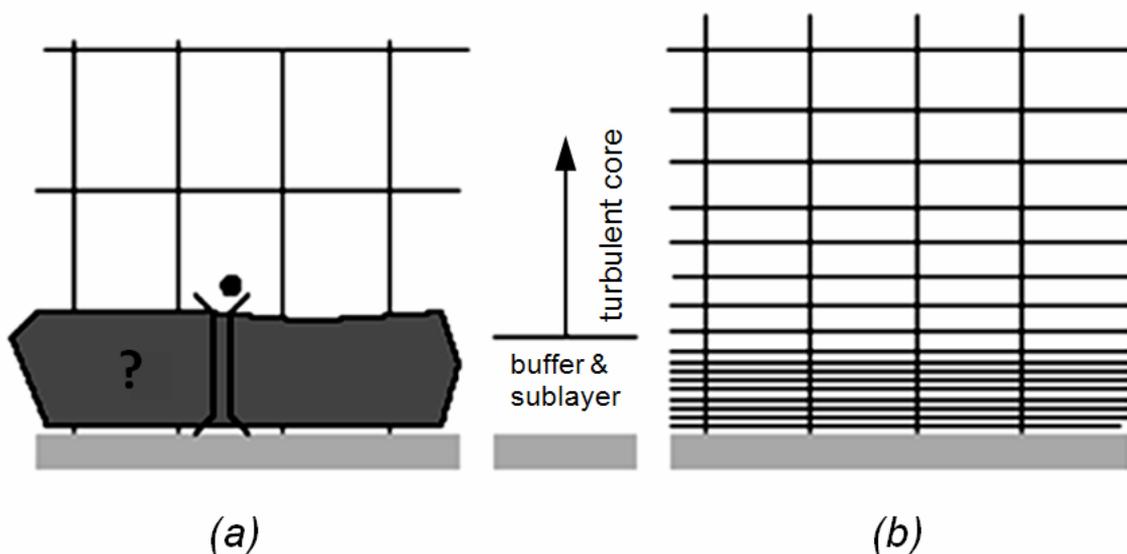


Abbildung 8: Behandlung des Wandnahen Bereichs: (a) Wall Function Approach, (b) Near-Wall Model Approach [3].

3.3.3.1 Standard Wall Functions

Die Standard-Wandfunktionen, die im verwendeten Berechnungsprogramm als Option zur Koppelung der Strömung im wandnahen Bereich an die Hauptströmung zur Verfügung stehen, basieren auf der Arbeit von Launder und Spalding (1974).

Die logarithmische Wandfunktion lautet

$$U^* = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^*), \quad (3.54)$$

in der κ die Kármánsche Konstante mit dem Wert 0.4187 und E eine empirische Konstante mit dem Wert 9.793 sind. Die logarithmische Wandfunktion wird für

Werte $y^* > 11.225$ eingesetzt. Gilt für die wandnächsten Zellen $y^* < 11.225$, so wird folgende Gesetzmäßigkeit verwendet

$$U^* = y^*, \quad (3.55)$$

mit

$$U^* = \frac{U_P C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}}{\tau_W / \rho}, \quad (3.56)$$

in der U_P die mittlere Geschwindigkeit im Zentrum P der wandnächsten Zelle ist, C_μ eine Konstante des Turbulenzmodells, und k_P die turbulente kinetische Energie im Zentrum P der wandnächsten Zelle. Detailliertere Darstellungen der Standard-Wandfunktionen und weitere Wandfunktionen für Energie, Spezies und Turbulenz finden sich in Fluent Theory Guide [3].

3.3.3.2 Enhanced Wall Treatment

Das im Simulationsprogramm zur Verfügung stehende Modell zur Behandlung des wandnahen Bereichs, das sogenannte *Enhanced Wall Treatment*, ist eine Methode, die das Zwei-Schichten-Modell mit erweiterten Wandfunktionen kombiniert. Unter Voraussetzung eines hoch aufgelösten Rechennetzes, in dem die viskose Unterschicht vollständig erfasst wird – typischerweise sollte y^+ etwa gleich 1 sein – entspricht das *Enhanced Wall Treatment*-Modell dem Zwei-Schichten-Modell.

Im Idealfall verfügt man über ein Modell zur Behandlung des wandnahen Bereichs, das sowohl für grobe, als auch für feine Rechennetze eingesetzt werden kann, und in dem der Fehler, der durch wandnächste Zellen auftritt, die sich weder in der voll turbulenten Schicht, noch in der viskosen Unterschicht befinden, möglichst gering ist [3]. Diesen Anforderungen versucht das *Enhanced Wall Treatment*-Modell gerecht zu werden. Mit diesem Modell wurde in der vorliegenden Diplomarbeit gearbeitet, daher wird es im Folgenden kurz beschrieben.

Zwei-Schichten-Modell

Das Zwei-Schichten-Modell für die Wandbehandlung mit dem *Enhanced Wall Treatment* bestimmt die turbulente Dissipation ε und die turbulente Viskosität μ_t in den wandnahen Zellen [3]. Definitionsgemäß stellt sich das Zwei-Schichten-Modell aus einem Gebiet, in dem viskose Effekte auftreten, und einem Bereich, wo die Turbulenz vollständig ausgebildet ist, zusammen. Die Abgrenzung der beiden Regionen erfolgt durch die turbulente Reynolds-Zahl [3]

$$Re_y = \frac{\rho y \sqrt{k}}{\mu}. \quad (3.57)$$

Hierin ist y der Normalabstand, bestimmt vom Zentrum der Zelle zur nächstliegenden Wand. Im vollständig turbulenten Bereich, wo die Bedingung $Re_y > 200$, erfüllt ist, wird beispielsweise eines der k, ε -Modelle eingesetzt. Im Bereich $Re_y < 200$ kommt das Eingleichungsmodell von Wolfstein (1969) zum Einsatz. Die kinetische Energie k berechnet sich wie in Abschnitt 3.2.5.4 bereits dargestellt. Für die Bestimmung der turbulenten Viskosität μ_t gilt [3]

$$\mu_{t,2-Schicht} = \rho C_\mu l_\mu \sqrt{k}, \quad (3.58)$$

wobei die Längenskala l_μ durch den Zusammenhang von Chen und Patel (1988)

$$l_\mu = y C_l^* \left(1 - e^{-Re_y / A_\mu} \right) \quad (3.59)$$

gegeben ist. Die angegebene turbulente Viskosität $\mu_{t,2-Schicht}$ für das Zwei-Schichten-Modell ist ein Teil des Enhanced Wall Treatment-Ansatzes, in dem die Definition von $\mu_{t,2-Schicht}$ nahtlos mit der Definition der turbulenten Viskosität für hohe Reynolds-Zahlen des äußeren Bereichs überlagert wird. Nach Jongen (1992) gilt

$$\mu_{t,enh} = \lambda_\varepsilon \mu_t + (1 - \lambda_\varepsilon) \mu_{t,2-Schicht} \quad (3.60)$$

wobei μ_t für die turbulente Viskosität bei hohen Reynolds-Zahlen steht. Die Überlagerungsfunktion λ_ε ist so definiert, dass sie den Wert 1 für den wandfernen Bereich, und den Wert 0 in Wandnähe hat.

$$\lambda_\varepsilon = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{Re_y - 200}{\frac{|\Delta Re_y|}{\operatorname{ar tanh}(0.98)}} \right) \right] \quad (3.61)$$

Der Hauptnutzeffekt der sogenannten Blending Function λ_ε ist die Vermeidung von Konvergenzschwierigkeiten, die auftreten können, wenn der Wert für μ_t in der äußeren Schicht nicht mit dem Wert μ_t aus dem Eingleichungsmodell von Wolfstein (1969) an der Grenze des durch viskose Effekte beeinflussten Gebiets übereinstimmt. Die Größe ε des durch Viskosität beeinflussten Gebiets berechnet sich durch

$$\varepsilon = \frac{k^{3/2}}{l_\varepsilon}, \quad (3.62)$$

wobei die Längenskala l_ε durch die Beziehung von Chen und Patel (1988)

$$l_\varepsilon = y C_l^* \left(1 - e^{-Re_y/A_\varepsilon} \right) \quad (3.63)$$

gegeben ist. Für die darin auftretenden Konstanten gelten die folgenden Beziehungen und Werte

$$\begin{aligned}
C_l^* &= \kappa C_\mu^{-3/4}, \\
A_\mu &= 70, \\
A_\varepsilon &= 2C_l^*.
\end{aligned}
\tag{3.64}$$

Enhanced Wall Functions

Die Enhanced Wall Functions basieren auf einem universellen Ansatz, der über den gesamten wandnahen Bereich – viskose Unterschicht - Übergangsbereich - turbulente Außenschicht – einsatzfähig ist. Um diesen Anforderungen zu genügen werden die linearen und logarithmischen Geschwindigkeitsprofile durch die folgende Funktion von Kader (1981) überbrückt [3]

$$u^+ = e^\Gamma u_{lam}^+ + e^{\frac{1}{\Gamma}} u_{turb}^+, \tag{3.65}$$

mit der Mischungsfunktion Γ

$$\Gamma = -\frac{a(y^+)^4}{1+by^+} \tag{3.66}$$

und den zugehörigen Konstanten $a=0.01$ und $b=5$. Dieser Ansatz ermöglicht das korrekte asymptotische Verhalten für große und für kleine Werte von y^+ und außerdem angemessene Geschwindigkeitsprofile für Zellen, die in den Übergangsbereich $3 < y^+ < 10$ fallen [3]. Obwohl das Enhanced Wall Treatment-Modell entwickelt wurde, um den Gültigkeitsbereich auch außerhalb der viskosen Unterschicht zu gewährleisten, wird darauf hingewiesen, dass das durch viskose Effekte beeinflusste Gebiet im wandnahen Bereich ($y^+ \approx 1$) genügend fein aufgelöst werden muss [3]. Folgende Anforderungen ergeben sich für die Erstellung des Rechenetzes [3]:

- Wird das Enhanced Wall Treatment in der Absicht verwendet, die viskose Unterschicht aufzulösen, so sollte y^+ an der wandnächsten Zelle in etwa 1 sein, bzw. deutlich innerhalb der viskosen Unterschicht liegen ($y^+ < 5$).

- Außerdem sollten mindestens zehn Zellen innerhalb des durch viskose Effekte beeinflussten Gebiets liegen ($Re_y < 200$), um die Turbulenzgrößen und die mittlere Geschwindigkeit korrekt berechnen zu können.

3.4 Kompressible Strömungen

In Gasströmungen, in denen große Druckgradienten und hohe Geschwindigkeiten auftreten, muss das kompressible Verhalten des Strömungsmediums berücksichtigt werden. Die Änderung der Gasdichte mit dem statischen Druck im Medium hat einen wesentlichen Einfluss auf die Strömungsgeschwindigkeit und die Temperatur. Kompressible Strömungen können durch Angabe der Mach-Zahl M charakterisiert werden.

$$M = \frac{u}{c}, \quad (3.67)$$

in der u die Strömungsgeschwindigkeit des Gases und c die Schallgeschwindigkeit sind, wobei c für ideale Gase durch die Beziehung

$$c = \sqrt{\kappa RT} \quad (3.68)$$

gegeben ist. Hierbei ist κ das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten für konstanten Druck c_p und konstantes Volumen c_v . R ist die spezifische Gaskonstante des Gases. Abhängig von dem Wert der Mach-Zahl unterscheidet man [8]:

- $M < 1$: Unterschallströmung (subsonisch);
- $M = 1$: die Strömung ist sonisch, das Medium strömt mit Schallgeschwindigkeit;
- $M > 1$: Überschallströmung (supersonisch);
- $M > 5$: Hyperschallströmungen (hypersonisch).

Häufig werden kompressible Strömungen idealer Gase (mit $c_p = \text{konstant}$) charakterisiert durch die Totaltemperatur T_0 und den Totaldruck p_0 , die im Verhältnis zu

deren statischen Größen (p und T) angegeben werden. Für das Verhältnis T_0/T gilt der Zusammenhang [8]

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\kappa - 1}{2} M^2. \quad (3.69)$$

Setzt man für T_0/T die Isentropenbeziehung für p_0/p ein, so kann das Verhältnis durch

$$\frac{p_0}{p} = \left(1 + \frac{\kappa - 1}{2} M^2 \right)^{\kappa/(\kappa - 1)} \quad (3.70)$$

ausgedrückt werden. Der Zusammenhang in Gl. (3.70) gibt die Änderung des statischen Drucks und der statischen Temperatur aufgrund der Geschwindigkeitsänderung für isentrope Strömungen an. Die Beziehung (3.69) unterliegt der Einschränkung einer isentropen Strömung dagegen nicht.

Das verwendete Simulationsprogramm beschreibt kompressible Strömungen durch Lösen der Kontinuitäts-, Impuls-, und Energie-Gleichung, wobei letztere eine korrekte Koppelung des Geschwindigkeits- und des Temperaturfeldes sicherstellt.

3.4.1 Ideale Gase

Im Falle kompressibler Strömungen verwendet das in dieser Arbeit eingesetzte Simulationsprogramm die thermische Zustandsgleichung idealer Gase in folgender Formulierung [3]

$$\rho = \frac{p_{op} + p}{\frac{R}{M_w} T}, \quad (3.71)$$

hier ist p_{op} der definierte Betriebsdruck, p ist der lokale, statische Druck relativ zum festgelegten Betriebsdruck. R steht für die universelle Gaskonstante und M_w ist die molare Masse. Die Temperatur T wird durch Lösen der Energiegleichung ermittelt.

3.4.2 Reale Gase

In der Gasdynamik, so wie auch in der Simulation der vorliegenden Arbeit, wird die thermische Zustandsgleichung für ideale Gase verwendet. Es sei hier jedoch kurz angesprochen, dass für die Behandlung realer Gase häufig ein Realgasfaktor z gemäß

$$z = \frac{pv}{RT} \quad (3.72)$$

definiert wird, der die Abhängigkeit der thermischen Zustandsgleichung vom Druck p , vom spezifischen Volumen v , und von der Temperatur T angibt. Für $z=1$ liegt ein ideales Gas vor. Je stärker dieser Wert von 1 abweicht, desto weniger ideal verhält sich das Gas. Zwei Realgas-Zustandsgleichungen seien hier zur Beschreibung realen Gasverhaltens angeführt [8]:

- die Van-der-Waals-Gleichung

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2} \quad (3.73)$$

- und die Redlich-Kwong-Gleichung

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{\sqrt{T}v(v+b)}. \quad (3.74)$$

In den Gleichungen (3.73) und (3.74) bedeutet der Parameter a den Kohäsionsdruck und der Parameter b – der schon aus Dimensionsgründen ein spezifisches Volumen sein muss – das Kovolumen. Detaillierte Informationen zum Verhalten realer Gase finden sich in Bošnjaković [7] und Rist [38].

3.4.3 Verdichtungsstöße

In diesem Abschnitt wird auf Diskontinuitäten in Strömungsfeldern in Form von Stößen eingegangen, da diese bei der Berechnung des Eindüsungsvorgangs in Erscheinung treten. Ausführliche Informationen sowie zugrundeliegende thermo-

dynamische Zusammenhänge finden sich in der einschlägigen Fachliteratur, wie z.B. Bošnjaković [7] oder Rist [38].

3.4.3.1 Senkrechter Verdichtungsstoß

Eine Druckwelle breitet sich mit der Geschwindigkeit des Schalls in einem Gas aus, vorausgesetzt die Druckamplituden sind klein im Vergleich zum Gasdruck [7]. Eine Druckwelle kann sich aber auch mit einer deutlich höheren Geschwindigkeit als der Schallgeschwindigkeit ausbreiten, wenn dies beispielsweise durch eine Detonation hervorgerufen wird. In Überschallwellen treten Stoßwellen auf, deren einfachste Form der senkrechte Verdichtungsstoß ist, dessen Stoßfront normal auf die Strömungsrichtung steht.

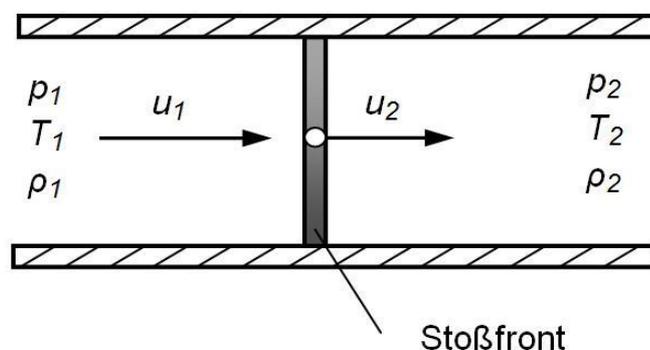


Abbildung 9: Gerader Verdichtungsstoß in einem Rohr [7].

Das Gas strömt mit der Geschwindigkeit u_1 , die größer als die lokale Schallgeschwindigkeit ist. Die Erkenntnisse aus Theorie und Praxis zeigen, dass sich die Überschallströmung mit der Geschwindigkeit u_1 sprunghaft – diskontinuierlich – in eine Unterschallströmung mit der Geschwindigkeit u_2 umsetzen kann, die geringer ist als die zum Zustand 2 gehörige Schallgeschwindigkeit. In diesem Fall nehmen Dichte ($\rho_2 > \rho_1$), Druck ($p_2 > p_1$) und Temperatur ($T_2 > T_1$) abrupt zu [7]. Dabei ist die Stoßfront, in der die sprunghafte Zustandsänderung stattfindet, eine äußerst dünne Gasschicht, die i.d.R. nur wenige mittlere freie Weglängen der Gasmoleküle beträgt [7].

3.4.3.2 Schräger Verdichtungsstoß

Es ist möglich, dass die Diskontinuität im Strömungsfeld in Form einer Stoßfront keinen senkrechten Stoß, sondern einen schrägen Stoß ausbildet, für dessen Stoßwinkel gilt: $\sigma \neq 90^\circ$.

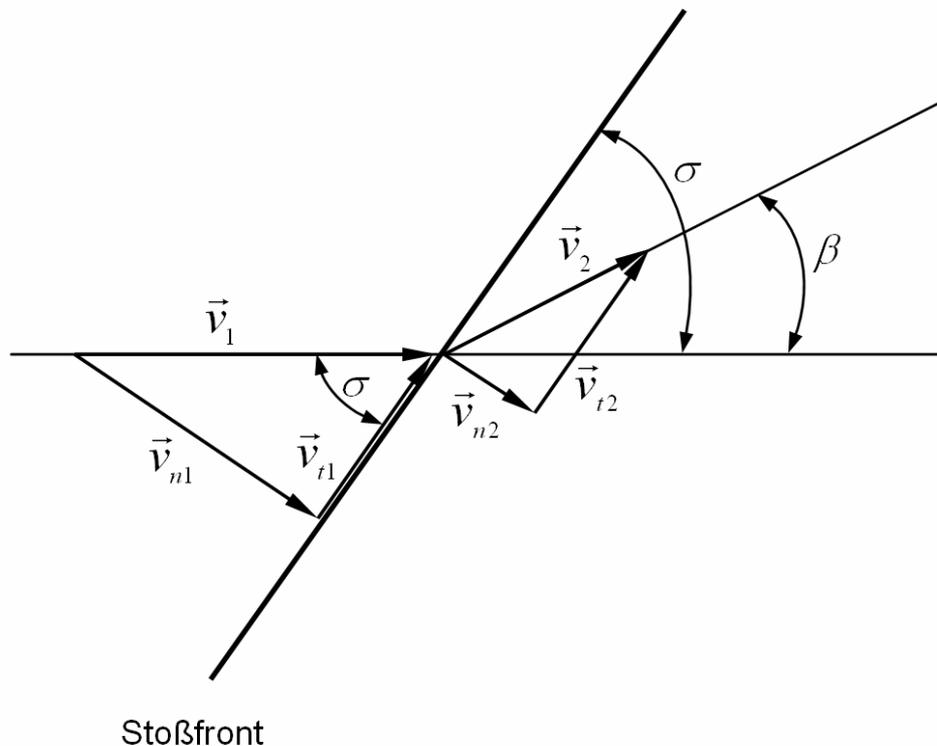


Abbildung 10: Der schräge Verdichtungsstoß mit horizontaler Zuströmung (Prinzipskizze) [8].

Die Geschwindigkeitskomponenten tangential zu der Stoßfront bleiben beim Stoßdurchgang unverändert, und für die Normalkomponenten der Geschwindigkeiten gelten die Gesetzmäßigkeiten des senkrechten Verdichtungsstoßes. Stellt man den Stoßwinkel σ und den Ablenkwinkel β in Beziehung zu einander und löst nach dem Ablenkwinkel β auf, so kann die Funktionsdarstellung [8]

$$\beta = \arctan \left[\frac{2 \cot \sigma (M_1^2 \sin^2 \sigma - 1)}{M_1^2 (\kappa + \cos 2\sigma) + 2} \right], \quad (3.75)$$

abhängig vom Stoßwinkel σ und von der Zuström-Mach-Zahl M_1 gebildet werden (siehe Abbildung 11).

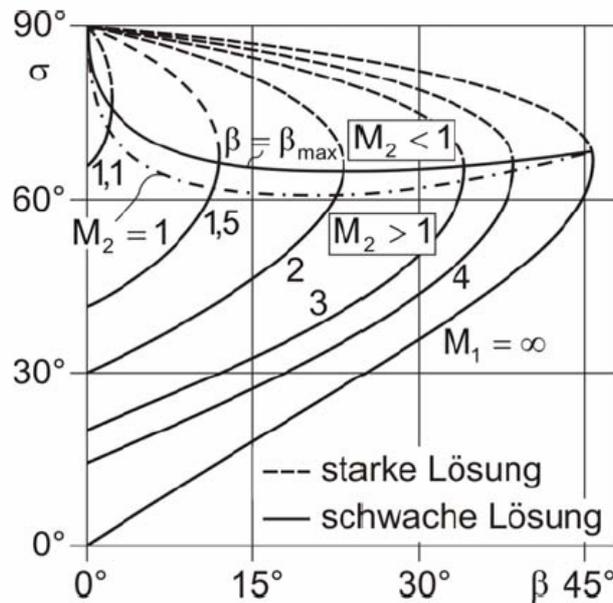


Abbildung 11: Stoßfrontwinkel σ bei schrägen Verdichtungsstößen als Funktion des Umlenkwinkels β und der Zufluss-Mach-Zahl M_1 [20] zitiert von [8].

Die Abbildung 11 zeigt, dass für einen gegebenen Ablenkwinkel β zwei Lösungen für den Stoßwinkel σ möglich sind. Eine „starke“ Lösung (steiler Stoß mit größerer Verdichtung), und eine „schwache“ Lösung (flacherer Stoß mit geringerer Verdichtung), wobei die Natur letztere Lösung als die „leichtere“ bevorzugt [8].

3.4.4 Hochdruck-Freistrahlen

In diesem Abschnitt werden theoretische Grundlagen über Freistrahlen gegeben, die dem Ausströmen eines Gases unter hohem Druck durch eine konvergente Düse in die freie Atmosphäre zugrunde liegen. Da ein wesentlicher Teil der vorliegenden Arbeit die modellgerechte Darstellung des Eindüsungsvorgangs – Eindringtiefe und Verteilung des Gasstrahls – in einer vereinfachten Geometrie ist, müssen zunächst wesentliche physikalische Mechanismen im Zusammenhang mit unterexpandierten Freistrahlen aufgezeigt werden, um ein breiteres Verständnis für diese Problematik zu schaffen.

3.4.4.1 Geschwindigkeitsfelder

Von einer unterexpandierten Düsenströmung ist die Rede, wenn ein Gas mit hohem Druck durch eine Düse strömt und bis zum Düsenaustrittsquerschnitt nicht auf den Gegendruck der Umgebung expandiert, sondern dort einen höheren statischen Druck erreicht als im umgebenden Fluid vorliegt. Im Falle einer konvergen-

ten Düse erreicht die Strömung des Gases im Düsenaustrittsquerschnitt den kritischen Zustand, und das Gas wird bis Schallgeschwindigkeit beschleunigt, sofern das Druckverhältnis über die Düse hinweg überkritisch ist. Nach der Düse muss naturgemäß das Gas weiterexpandieren, wenn der Gegendruck unter dem kritischen Druck in der Düsenmündung liegt. Dadurch wird die Geschwindigkeit auf Überschallniveau gesteigert. Es bildet sich ein Expansionsgebiet aus, dem ein Kompressionsgebiet folgt, und beide Gebiete zusammen erzeugen die erste Überschall-Strahlzelle, der je nach Druckverhältnis weitere Strahlzellen folgen können [38]. Erstmals wurde diese periodische Strahlstruktur von Lord Rayleigh (1879) beobachtet. In der Praxis sind solche Erscheinungen beispielsweise an unterexpandierten Abgasstrahlen von Luftstrahltriebwerken unter Umständen mit freiem Auge zu erkennen.

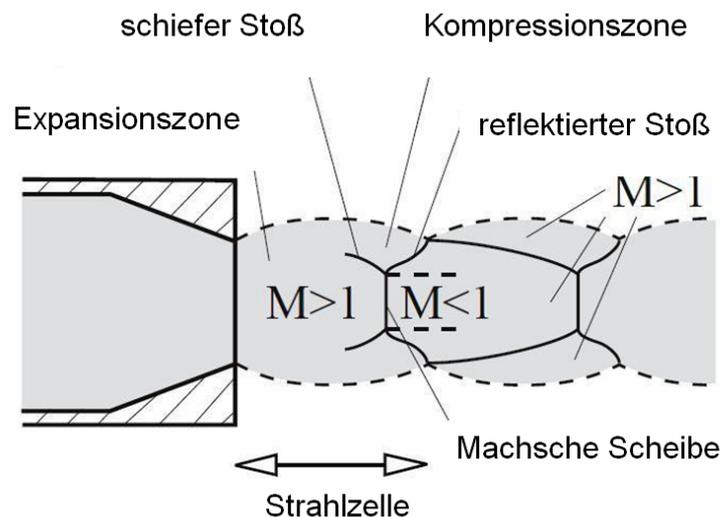


Abbildung 12: Anfang eines unterexpandierten Gasstrahls mit Überschall (Prinzipskizze) [37].

Ist ein bestimmtes Druckverhältnis gegeben, so entsteht in der Überschallzelle ein schräger (bzw. „schiefer“) Verdichtungsstoß, dessen Bereich den Strahlkern mantelflächenartig umhüllt. Die Abgrenzung dieses Stoßbereiches bildet unter bestimmten Voraussetzungen ein normal zur Strahlachse stehender scheibenförmiger senkrechter Stoß (Machsche Scheibe). Direkt nach einem senkrechten Stoß strömt das Gas immer mit Unterschallgeschwindigkeit weiter [38]. Bei schiefen Stößen kann es dagegen auch nach der Stoßfront noch mit Überschallgeschwindigkeit strömen. Nach dem senkrechten Stoß tritt ein Kompressionsgebiet mit Unterschallströmung auf, dem häufig ein Expansionsgebiet folgt, wodurch die Strömungsgeschwindigkeit wieder erhöht wird. Im Bereich außerhalb der Ummante-

lung des Strahlkerns durch den schiefen Stoß bildet sich eine in Strömungsrichtung dicker werdende Mischzone aus, an deren Grenze, dem Strahlrand, ein Impulsaustausch mit der Umgebung stattfindet. In einiger Entfernung von der Düsenmündung geht der Freistrah in Unterschallgeschwindigkeit über, und die periodische Struktur des Strahls verschwindet. In Abbildung 13 ist ein rotationssymmetrischer (Unterschall-) Freistrah mit seinen Strömungsbereichen abgebildet.

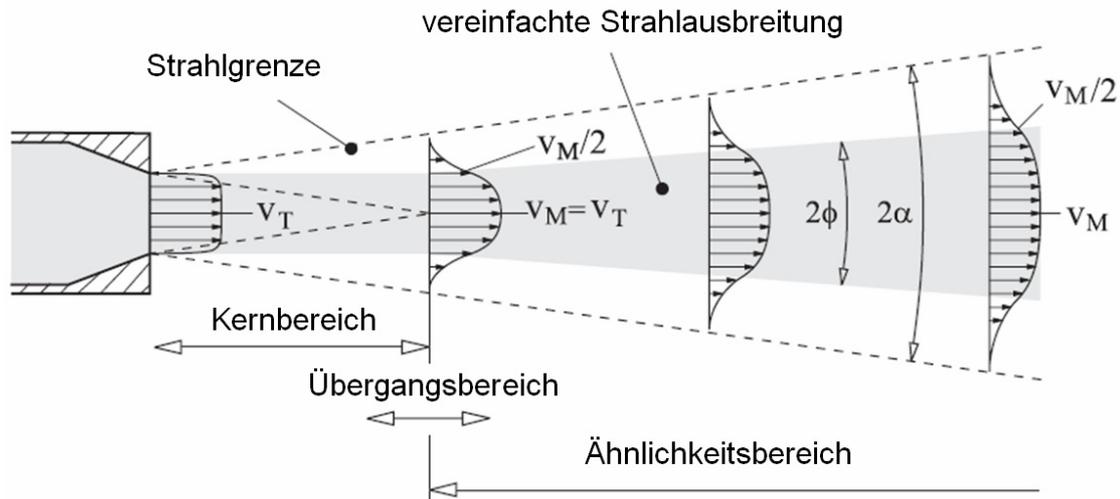


Abbildung 13: Ausbreitung eines turbulenten Freistrahls bei Unterschall [37].

Anschließend an die Düsenmündung steht der Kernbereich, weiter stromabwärts folgend der Übergangsbereich, und schließlich der Ähnlichkeitsbereich. Treten Überschall-Freistrahlen auf, so schließt der (Unterschall-) Kernbereich an den Überschallbereich mit seinen Expansions- und Kompressionsgebieten an. Folgende Aspekte beeinflussen die Strahlmerkmale [38]:

- Totaldruckniveau in der Düse und statischer Gegendruck der Umgebung;
- geometrische Anordnung und Form der Düse;
- freie oder begrenzende Umgebung des Freistrahls;
- Dichteunterschiede von Freistrahls- und Umgebungsmedium;
- Turbulenzgrad der Düsenströmung;
- Charakter der Grenzschicht, welche die freie Strahlgrenze bildet;
- den relativen Wirkungen von Auftrieb und Schwerkraft.

Ausführliche Darstellungen zur Freistrahls-Thematik finden sich in Rist [38].

4 Numerische Simulation

4.1 Grundlagen der Diskretisierung

Da die analytische Lösung der Navier-Stokesschen Gleichungen bzw. der RANS-Gleichungen für die meisten technisch relevanten Strömungsprobleme nicht möglich ist, besteht die Notwendigkeit, zur Lösung der Gleichungen numerische Verfahren einzusetzen. In diesem Abschnitt werden Verfahren zur Diskretisierung der partiellen Differentialgleichungen dargestellt, welche die Grundlage für jede numerische Simulation von Transportvorgängen bilden. Dabei soll eine Übersicht über die Vor- und Nachteile der einzelnen Verfahren gegeben werden. Die am häufigsten eingesetzten Verfahren sind neben der Methode der Finiten Volumen, die meistens in der Berechnung von Strömungsproblemen Anwendung findet, die Methoden der Finiten Differenzen und der Finiten Elemente.

Ziel der numerischen Behandlung von partiellen Differentialgleichungen ist es, die differenziellen Zusammenhänge in algebraische Gleichungen überzuführen. Das bedeutet aber, dass die numerische Lösung nur diskret an den dafür vorgesehen Gitterpunkten bestimmt wird. Schon aus dieser Überlegung ist ersichtlich, dass die Genauigkeit der Ergebnisse von der Rechenetzlegung abhängen muss, also von der räumlichen Diskretisierung. Bei instationären Problemen kommt noch der Aspekt der zeitlichen Diskretisierung hinzu.

4.1.1 Finite Differenzen

Die Finite-Differenzen-Methode basiert auf Taylorreihenentwicklungen um Netzpunkte, die meist nach wenigen Termen abgebrochen werden. Exemplarisch sei die Taylorreihenentwicklung einer Funktion f um den Gitterpunkt m dargestellt [45]. Die Punkte $m - 1$ und $m + 1$ befinden sich im Abstand Δx vom Punkt m .

$$f_{m+1} = f_m + \Delta x \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_m + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_m + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right)_m + \dots \quad (4.1)$$

und

$$f_{m-1} = f_m - \Delta x \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_m + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_m - \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right)_m + \dots \quad (4.2)$$

Dabei tritt der Abbruchfehler Δx^n mit n der Anzahl der Ableitungen in der Taylorreihe auf. Die Ordnung der höchsten Ableitung entspricht der Diskretisierungsordnung. Mit obigen Taylorreihen wird nun ein Drei-Punkt-Verfahren der zentralen Finiten Differenzen zur Berechnung der ersten und zweiten Ableitungen durchgeführt. Subtrahiert man Gl. (4.1) von Gl. (4.2) so erhält man nach Abbruch der Taylorreihe nach der Ableitung zweiter Ordnung

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_m = \frac{f_{m+1} - f_{m-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2). \quad (4.3)$$

Addiert man hingegen Gl. (4.1) mit Gl. (4.2), so ergibt das

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_m = \frac{f_{m+1} - 2f_m + f_{m-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2). \quad (4.4)$$

Vorteile der Finite-Differenzen-Methode sind, neben der einfachen Berechnung, der genau definierte Diskretisierungsfehler. Schwierigkeiten treten jedoch in praktischer Anwendung auf, wenn das Verfahren zur Beschreibung von Strömungsfeldern in komplexen Geometrien eingesetzt wird. Aus diesem Grund beschränkt sich der Anwendungsbereich der Methode der Finiten Differenzen auf strukturierte orthogonale Rechennetze. Einen Weg, diese Einschränkung zu umgehen, ermöglicht die Methode der Finiten Volumen, die für den Gebrauch in Strömungssimulationen prädestiniert ist.

4.1.2 Finite Volumen

Bei der Methode der Finiten Volumen erfolgt die Diskretisierung des Strömungsgebiets durch Aufteilen in endliche Volumina, die vorerst beliebig geformt sein können, sich jedoch nicht überlagern dürfen. Diese Methode ermöglicht, im Gegensatz zur Finite-Differenzen-Methode, die Behandlung von komplexen Geometrien mit unstrukturierten, nicht orthogonalen Rechennetzen. Für jedes der diskre-

ten Volumina gelten die bekannten Erhaltungssätze physikalischer Größen auf die im Abschnitt 3.1 eingegangen wurde. In diesem Verfahren bleiben daher die konservativen Größen definitionsgemäß erhalten [45].

Mit Anwendung des Gaußschen Integralsatzes werden Integrale der Divergenzen in Flussbilanzen über die Oberfläche umgewandelt. Die Veränderung einer konservativen Größe in einer Zelle kann nur durch Zu- oder Abfließen über die Oberfläche (im dreidimensionalen Raum) erfolgen. Der Grad der Genauigkeit der berechneten Flussterme ist verantwortlich für den auftretenden Diskretisierungsfehler. Die Methode der Finiten Volumen basiert auf der integralen Form der Erhaltungsgleichungen. Es kann daher auch unstetige Strömungsfelder lösen, da die konservativen Größen erhalten bleiben.

4.1.3 Finite Elemente

Analog zur Finite-Volumen-Methode teilt man hier das Rechengebiet in eine beliebig große Anzahl von Elementen auf, die sich nicht überdecken dürfen. Die Finite-Elemente-Methode approximiert die Differentialgleichungen durch Bildung algebraischer Elementgleichungen in jedem Gitterpunkt i mit der Lösungsfunktion [35]

$$f^* = \sum_{i=1}^n f_i \Psi_i \quad (4.5)$$

und der darin enthaltenen Ansatzfunktion Ψ_i . Da diese Methodik für nichtlineare Differentialgleichungen, wie z.B. die Navier-Stokesschen Gleichungen, schlecht geeignet ist, kommt es meist in der Strukturmechanik zur Anwendung. Vorteilhaft ist die Flexibilität des Verfahrens hinsichtlich der Wahl der Geometrie, da es durch die günstige Charakteristik des Interpolationsansatzes auch für unregelmäßige, komplexe Rechnetze geeignet ist. Außerdem kann die Genauigkeit durch geeignete Wahl der Ansatzfunktion Ψ_i angepasst werden. Die Finite Elemente Methode geht von integraler Formulierung der Differentialgleichungen aus, behandelt diese aber verschieden im Vergleich zur Finiten Volumen Methode. Zur Anwendung kommen Verfahren, wie Methode der gewichteten Residuen, Variationsmethoden und schwache Lösung von partiellen Differentialgleichungen [35].

4.2 Implementierung

Prinzipiell stellt das eingesetzte Simulationsprogramm Fluent zwei Löser zur Auswahl: den Pressure-Based Solver und den Density-Based Solver, die je nach spezifischer Problemstellung unterschiedliche Vorzüge in Hinblick auf Konvergenzgeschwindigkeit und Stabilität haben. Letzterer ist besonders für kompressible Strömungen mit hohen Geschwindigkeiten geeignet. Aufgrund dieser Tatsache wurde der Density-Based Solver zur Berechnung der Aufgabenstellungen in den Kapiteln 5 und 7 verwendet, da sich beispielsweise beim Eindüsungsvorgang ein unterexpandierter Hochdruck-Gasstrahl ausbildet, der in den ersten Strahlzellen deutlich auf Überschall beschleunigt und durch stark kompressibles Verhalten des Fluids gekennzeichnet ist. Hingegen wurden die Simulationen der reagierenden Rohrströmungen in Kapitel 6 mit dem Pressure-Based Solver von Fluent 12.0 ausgeführt, der für diese Anwendungen stabile Berechnungen und keinerlei Konvergenzschwierigkeiten zeigte.

Beide Löser berechnen die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und, falls die Problemstellung dies erfordert, auch für Energie, Turbulenz und chemische Spezies. Die Diskretisierung des Berechnungsgebiets erfolgt durch die Finite Volume Methode bestehend aus [3]:

- Erstellung eines Rechengitters aus diskreten Volumina.
- Integration der Erhaltungsgleichungen und sonstiger konstitutiver Beziehungen in die Rechenvolumina, um ein System von algebraischen Gleichungen für die von den diskreten Punkten abhängigen Unbekannten, wie z.B. Druck, Geschwindigkeit oder Temperatur etc., zu bilden.
- Linearisierung der diskreten Gleichungen und lösen des resultierenden Gleichungssystems, um die zu berechnenden Werte der gesuchten Größen zu bestimmen.

Density-Based Solver

Für die Lösung der Aufgabenstellungen in dieser Arbeit wurde überwiegend der Density-Based Solver eingesetzt, da dieser besonders für kompressible Strömungen mit hohen Geschwindigkeitsgradienten geeignet ist, wie diese bei der Berechnung des Eindüsungsvorganges in Erscheinung treten. Daher wird auf diesen Löser im Folgenden näher eingegangen. Der Density-Based Solver löst simultan die miteinander gekoppelten Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Energie und

falls erforderlich für chemische Spezies. Zusätzliche Gleichungen werden sequenziell und getrennt vom gekoppelten Gleichungssatz gelöst. Eine Iterationsschleife besteht aus folgenden Schritten, die bis zum Erreichen des Konvergenzkriteriums fortlaufend durchgeführt werden (siehe Abbildung 14) [3]:

- 1) Neu Berechnen der Fluideigenschaften, basierend auf der aktuellen Lösung (bei Berechnungsstart ist die initialisierte Lösung Ausgangspunkt der Berechnung).
- 2) Simultanes Lösen des gekoppelten Gleichungssystems (Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Energie und chem. Spezies).
- 3) Lösen etwaiger zusätzlicher Gleichungen (Turbulenz, Strahlung, Reaktionen, etc.).
- 4) Für den Fall, dass die Beeinflussung des Strömungs- und Temperaturfeldes durch eine zusätzliche Phase (z.B. Partikel, Tropfen, etc.) inkludiert werden soll, wird dies in diesem Schritt berechnet.
- 5) Prüfen, ob die Konvergenzkriterien des Gleichungssystems erfüllt sind.

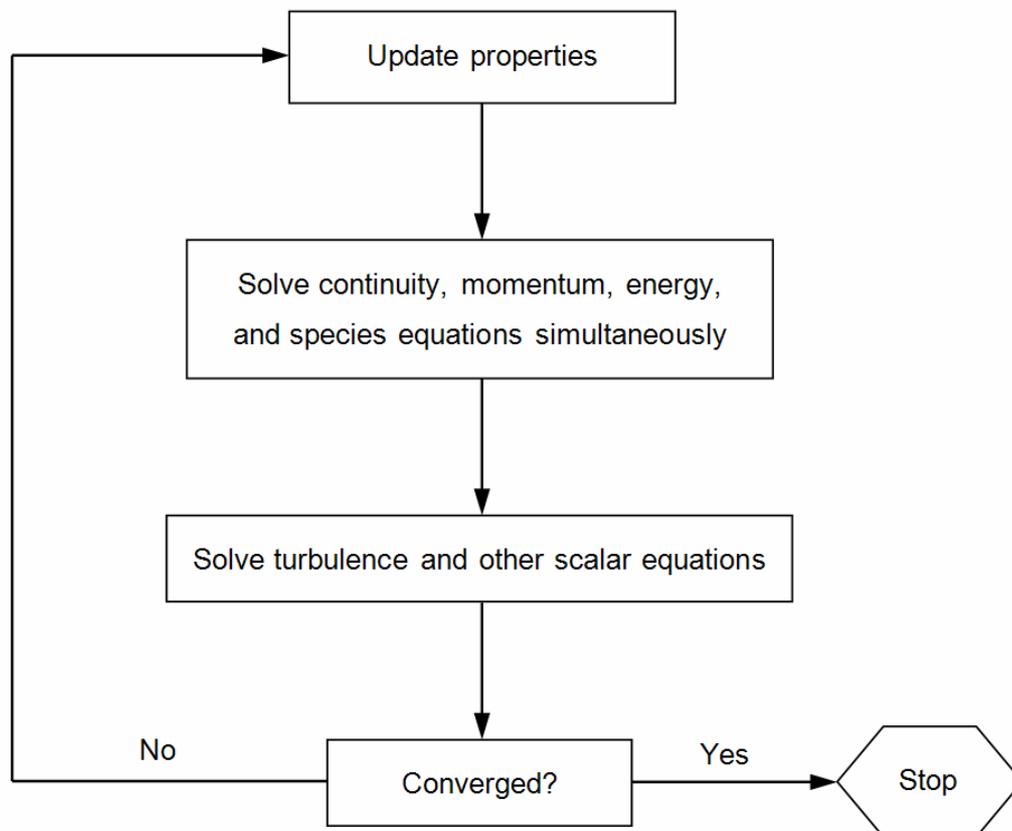


Abbildung 14: Density-Based Solution Method [3].

Grundsätzlich ist die Formulierung des Gleichungssystems mit dem Density-Based Solver in expliziter und in impliziter Form möglich. Bei der expliziten Schreibweise werden für eine gesuchte Größe die zu ermittelnden Werte in jeder Zelle durch eine Beziehung berechnet, die nur bekannte Werte beinhaltet. Im Gegensatz dazu sind bei der impliziten Formulierung bekannte und unbekannte Werte der benachbarten Zellen inkludiert. Daher treten die unbekanntenen Werte in mehr als nur einer Gleichung auf und müssen simultan ermittelt werden.

Das in dieser Arbeit verwendete Konzept zur Lösung des gekoppelten Gleichungssystems in impliziter Formulierung bestimmt für alle Zellen die Werte der Unbekannten (Druck p , Geschwindigkeiten u , v , w und Temperatur T) zur selben Zeit. Dieses Vorgehen bringt eine physikalische Koppelung des Gleichungssystems mit sich, das im Vergleich zum sequentiellen Lösen das physikalische Verhalten der Strömung genauer beschreibt, jedoch einen erhöhten Speicheraufwand nach sich zieht.

4.2.1.1 Gleichungssystem

Hier wird die mathematische Formulierung des gekoppelten Gleichungssystems, das die Strömungseigenschaften eines Fluids beschreibt, dargestellt. In kartesischen Koordinaten, angesetzt an einem Kontrollvolumen dV mit der Oberfläche dA , gilt für das gekoppelte Gleichungssystem [3]

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V W dV + \oint [F - G] \cdot dA = \int_V H dV, \quad (4.6)$$

hier sind F , G und W definiert als

$$W = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho e \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho \vec{v} \\ \rho \vec{v} u + p \hat{i} \\ \rho \vec{v} v + p \hat{j} \\ \rho \vec{v} w + p \hat{k} \\ \rho \vec{v} e + p \vec{v} \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xi} \\ \tau_{yi} \\ \tau_{zi} \\ \tau_{ij} v_j + q \end{bmatrix}. \quad (4.7)$$

Dabei steht der Vektor H für einen beliebigen Quellterm wie z.B. äußere Kräfte oder Wärmequellen. ρ , \vec{v} , e , und p sind die Dichte, der Geschwindigkeitsvektor, massenspezifische, totale Energie und der vorherrschende statische Druck. τ sind die Spannungen aufgrund viskoser Effekte und \vec{q} stellt den gerichteten Wärmestrom dar. Außerdem gilt für die spezifische totale Energie e die Beziehung mit der massenspezifischen Enthalpie h

$$e = h + \frac{\vec{v}^2}{2} - \frac{p}{\rho}. \quad (4.8)$$

Aufgrund der großen Differenz zwischen Strömungsgeschwindigkeit und Schallgeschwindigkeit bei geringen Mach-Zahlen führt das Lösen des Gleichungssystems (4.7) zu numerischer Steifheit, die sich in praktischer Anwendung in geringer Konvergenzgeschwindigkeit äußert. Für inkompressible Fluide ist die Schallgeschwindigkeit unendlich groß. Daher gilt das steife Verhalten auch für inkompressible Medien – unabhängig von der Strömungsgeschwindigkeit. Dieser Tatsache wirkt das CFD-Programm Fluent mit einer Technik von Weiss und Smith (1995), dem sogenannten Preconditioning entgegen [3].

4.2.1.2 Roe Flux-Difference Splitting-Methode

Der in Gl. (4.7) gezeigte Fluss-Vektor F ermittelt sich mit einer Standard Upwind Flux-Difference Splitting-Methode nach Roe [39]. Dieser Ansatz besagt, dass sich die im Fluss-Vektor enthaltenen charakteristischen Informationen über das gesamte Rechengebiet mit einer bestimmten Richtung und Geschwindigkeit ausbreiten, abhängig von den Eigenwerten. So wird folgende Beziehung für die diskretisierten Flüsse der betreffenden Zelle formuliert [3]

$$F = \frac{1}{2}(F_R + F_L) - \frac{1}{2}\Gamma|\hat{A}|\delta Q. \quad (4.9)$$

Hierin ist δQ die Differenz $Q_R - Q_L$. Die darin auftretenden Flüsse $F_R = F(Q_R)$ und $F_L = F(Q_L)$ werden durch die berechneten Lösungsvektoren Q_L und Q_R

der linken und rechten Seite der Zellfläche bestimmt. Die Bestimmung der Matrix $|\hat{A}|$ gründet auf den Zusammenhang

$$|\hat{A}| = M|\Lambda|M^{-1}, \quad (4.10)$$

wobei Λ die Diagonalmatrix der Eigenwerte ist und M die Eigenwertmatrix zur Diagonalisierung von $\Gamma^{-1}A$ mit der Jakobimatrix A . Eine detaillierte Ausführung der Roe Flux-Difference Splitting-Methode findet sich in Roe [39] und [40].

4.2.1.3 Zeitliche Diskretisierung

Die zeitliche Diskretisierung des gekoppelten Gleichungssystems erfolgt sowohl für instationäre, als auch für stationäre Strömungsprobleme [3]. Letztere geht davon aus, dass sich die stationäre Lösung nach einer bestimmten Anzahl von Zeitschritten eingestellt hat. Nun besteht bei der zeitlichen Diskretisierung wiederum die Wahl zwischen impliziter und expliziter Formulierung. Im Folgenden werden die mathematischen Beziehungen der in der Berechnung verwendeten impliziten Formulierung zusammenfassend angeführt.

Im Falle impliziter zeitlicher Diskretisierung verwendet das Simulationsprogramm Fluent eine implizite Euler-Diskretisierung, in Verbindung mit einem Newtonschen Linearisierungsverfahren der Flüsse, um zu einem linearisierten System nach Weiss et al. (1997) der Form [3]

$$\left[D + \sum_j^{N_{faces}} S_{j,k} \right] \Delta Q^{n+1} = -R^n, \quad (4.11)$$

zu kommen. Hierbei sind D und $S_{j,i}$ gegeben durch

$$D = \frac{V}{\Delta t} \Gamma + \sum_j^{N_{faces}} S_{j,i}, \quad (4.12)$$

$$S_{j,k} = \left(\frac{\partial F_j}{\partial Q_k} - \frac{\partial G_j}{\partial Q_k} \right) A_j. \quad (4.13)$$

Der Residuen-Vektor R^n und der Zeitschritt Δt sind durch die folgenden Beziehungen gegeben

$$R^i = \sum^{N_{faces}} (F(Q^i) - G(Q^i)) \cdot A - VH, \quad (4.14)$$

$$\Delta t = \frac{2CFL \cdot V}{\sum_f \lambda_f^{max} A_f}. \quad (4.15)$$

Dabei steht CFL für die Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl, und V für das Zellvolumen. A_f ist hierin die Zellfläche und λ_f^{max} ist der maximale lokale Eigenwert.

Obige implizite Formulierung der zeitlichen Diskretisierung Gl. (4.11), wird nun in Verwendung folgender Verfahren gelöst: Incomplete Lower Upper-Faktorisierung (ILU), oder mittels Gauss-Seidel-Algorithmus, beide in Verbindung mit der Algebraic Multigrid (AMG) Methode.

4.2.1.4 Unterrelaxation

Explizite Unterrelaxation ist ein Verfahren, das erheblich zur Erhöhung der Stabilität des Berechnungsablaufs beitragen kann, indem die Werte des Lösungsvektors Q in einer folgenden Iteration nicht auf die neu errechneten Werte gesetzt wird, sondern eine Gewichtung der Änderung der Größen durch einen Faktor kleiner oder gleich Eins erfolgt. Diese Methode drückt sich in der folgenden Beziehung aus

$$Q_{neu} = Q_{alt} + \alpha \Delta Q. \quad (4.16)$$

Dabei ist $\alpha \in (0,1]$ der Unterrelaxationsfaktor, der vom Benutzer vorgegeben werden kann und standardmäßig mit dem Wert 0.75 festgelegt ist. Q_{neu} ist der tat-

sächlich vorgegebene neue Lösungsvektor, der aus den alten Werten Q_{alt} und der gedämpften Änderung resultiert.

4.3 Konvergenzkriterien

Die Eingabe der Konvergenzkriterien ist in Fluent grundsätzlich für jede Gleichung möglich. Generell wird empfohlen, das Konvergenzkriterium der Residuen einzelner Gleichungen auf die Werte 10^{-3} bzw. für die Energiegleichung auf den Wert 10^{-6} festzusetzen. Es ist jedoch auch möglich, dass sich die Residuen nicht auf die festgelegten Werte verkleinern und trotzdem konvergierte Lösung vorliegt.

Andererseits muss ausdrücklich darauf hingewiesen werden, dass selbst beim Erreichen der oben genannten Werte für die Residuen die Konvergenz aller problemspezifischen Größen nicht garantiert ist. Vielmehr müssen zusätzliche Monitore problemrelevanter Größen (z.B. der Massenanteil einer Spezies, die an einer chemischen Reaktion beteiligt ist) über den Berechnungsfortschritt beobachtet werden. Erst wenn von Iterationsschritt zu Iterationsschritt keine Änderungen mehr zu verzeichnen sind, kann von einer konvergenten Lösung gesprochen werden.

4.4 Anfangs- und Randbedingungen

Für eindeutige Lösungen der auf den Erhaltungssätzen gründenden partiellen Differentialgleichungen sind Anfangs- und Randbedingungen erforderlich. Anfangs- bzw. Startwerte zum Zeitpunkt $t=0$ sind auch für die numerische Behandlung stationäre Strömungsverhältnisse erforderlich. Durch Initialisieren werden allen Größen Startwerte zugeordnet, wobei die Qualität von deren Schätzung die Stabilität und Konvergenz der Simulation maßgeblich beeinflussen kann. Im Simulationsprogramm besteht die Option, spezifische Werte definierter Fluidzonen vorzugeben.

Randbedingungen sind durch problemspezifische Gegebenheiten wie Geometrie und physikalische Zusammenhänge festgelegt. Folgende Randbedingungen sind häufig bei Strömungssimulationen in Verwendung:

- Eintrittsrandbedingung (z.B. Druck, Geschwindigkeit, Massenstrom);
- Austrittsrandbedingung (z.B. Druck, Geschwindigkeit, Massenstrom);
- Symmetrierandbedingung;

- Wandrandbedingung (z.B. Haftbedingung, Temperaturrendbedingung);
- Periodische Randbedingungen.

5 Eindüsungsvorgang

5.1 Einleitung

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der CFD-Simulationen der Eindüsung eines Wasserdampf-Ammoniak-Gemisches in ein Kesselsegment vorgestellt. Um die Resultate der Simulationen hinsichtlich Plausibilität zu überprüfen, wird der Eindüsungsvorgang mit Wasserdampf isentrop von Hand berechnet und anschließend die Geschwindigkeiten in der Düsenmündung und im düsennahen Freistrahle mit den Ergebnissen der CFD-Simulation verglichen. Es erfolgt eine Beurteilung der Rauchgasströmung anhand dimensionsloser Kennzahlen, die u.a. die Bedeutung der Schwerkraft für die vorliegende Strömungssituation erkennen lassen. Ferner wird die Mischungsqualität des eingedüsten Reduktionsmittels Ammoniak mit den Rauchgasen berechnet, die als Maß für die Güte des Verfahrens herangezogen werden kann. Dazu wird die Schwankungsbreite des Ammoniak-Massenanteils bei 3 und 4 bar Düsenvordruck in mehreren Höhen über der Eindüsungsebene berechnet, miteinander verglichen, und Tendenzen des Verhaltens der Anlage detektiert.

5.2 Thermodynamik des Eindüsungsvorgangs

Die Berechnung des Eindüsungsvorgangs mittels CFD-Simulation ist ein wesentlicher Aufgabenpunkt dieser Arbeit. Ziel ist es, das Eindüungsverhalten – Eindringtiefe und Verteilung des Reduktionsmittels – in einer einfachen Geometrie aufzuzeigen. Um die Ergebnisse der CFD-Simulation überprüfen zu können, wird der Eindüsungsvorgang mit den bekannten Formeln für kompressible eindimensionale Strömung berechnet. Die Berechnung erfolgt unter Voraussetzung einer isentropen Zustandsänderung. Der Eindüsungsvorgang wird für die Handrechnung ausschließlich mit Wasserdampf berechnet, da der Ammoniakmassenanteil nur 6.5% (4 bar Düsenvordruck) beträgt und sich die Dichten der beiden Medien nicht wesentlich unterscheiden ($\rho_{H_2O} = 1.95 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{NH_3} = 1.82 \text{ kg/m}^3$ bei 4 bar und 182°C).

5.2.1 Berechnung der Randbedingungen

Die Regelung der Eindüsung an der Anlage erfolgt durch Einstellen des gewünschten Düsenvordrucks des Wasserdampf-Ammoniak-Gemisches nach bereits erfolgter Zudosierung des für die Entstickung notwendigen Ammoniakmassenstroms zum Trägermedium Wasserdampf. Im Simulationsmodell werden hingegen der Totaldruck, die Totaltemperatur und die Zusammensetzung des Wasserdampf-Ammoniak-Gemisches als Randbedingung am Düseneintritt vorgegeben. Für die Berechnung der Randbedingungen wird gefordert, dass der Wasserdampf im Düsenaustritt im gesättigten Zustand vorliegt. Die Berechnung der Randbedingungen erfolgt mit Hilfe der Grundlagen kompressibler eindimensionaler Strömungen mit isentroper Zustandsänderung nach [8] und [17]. Folgende Berechnung wird für Wasserdampf (ideales Gas) durchgeführt, wobei die Zustände am Düseneintritt mit 0 und am Düsenaustritt mit k bezeichnet werden und die Druckangaben Absolutwerte sind. Die Angaben für die Berechnung der Randbedingungen des Strömungsvorgangs sind in Tabelle 1 zusammengestellt.

Tabelle 1: Angaben für die Berechnung der Randbedingungen.

Druck	
Düsenvordruck p_0	400000 Pa
Gegendruck p_1	100000 Pa
Geometrie der Düse	
Eintrittsdurchmesser D	12 mm
Austrittsdurchmesser d	4 mm
Fluid	
Wasserdampf	ideales Gas ($\kappa=1.3$)

Für das kritische Druckverhältnis gilt definitionsgemäß für Strömungsvorgänge ausgehend vom Ruhezustand die Beziehung [17]

$$\frac{p_k}{p_{0,tot}} = \left(\frac{2}{\kappa + 1} \right)^{\frac{\kappa}{\kappa - 1}}, \quad (5.1)$$

die nur vom Isentropenexponenten κ des Gases abhängt. $p_{0,tot}$ ist der Totaldruck am Düsen Eintritt, der als Randbedingung vorgeben werden soll. In der iterativen Vorgehensweise für die Berechnung der Randbedingungen wird zunächst ein Startwert für den Totaldruck $p_{0,tot}$ eingesetzt. Da es sich im vorliegenden Fall um die Durchströmung einer konvergenten Düse handelt, können im Austrittsquerschnitt trotz $\frac{p_1}{p_{0,tot}} < \frac{p_k}{p_{0,tot}}$ (=überkritisches Druckverhältnis) nur der kritische Druck p_k und die kritische Geschwindigkeit w_k erreicht werden. Die Totaltemperatur am Düsen Eintritt $T_{0,tot}$ berechnet sich für isentrope Zustandsänderung mit kritischem Druckverhältnis durch

$$\frac{T_k}{T_{0,tot}} = \frac{2}{\kappa + 1}. \quad (5.2)$$

Mit der Forderung, dass real im Düsenaustritt Sättigungszustand (reales Gasverhalten) des Wasserdampfes vorliegen soll, wird die Temperatur T_k (=Sättigungstemperatur) des Wasserdampfes beim Druck p_k einer Stoffwertesammlung entnommen. Mit der thermischen Zustandsgleichung idealer Gase lässt sich die totale Dichte $\rho_{0,tot}$ berechnen.

$$\rho_{0,tot} = \frac{p_{0,tot}}{RT_{0,tot}} \quad (5.3)$$

Hier ist R die Gaskonstante für Wasserdampf mit dem Wert 461.5 J/kgK. Um den Massenstrom \dot{m} der Düsenströmung zu bestimmen, wird zunächst der Maximalwert der Durchflussfunktion ψ_{max}

$$\psi_{max} = \left(\frac{2}{\kappa + 1} \right)^{\frac{1}{\kappa - 1}} \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa + 1}} \quad (5.4)$$

berechnet. ψ_{max} tritt beim kritischen Druckverhältnis auf und ist für ein gegebenes Gas nur vom Isentropenexponent κ abhängig. Mit den oben ermittelten Größen wird nun der Massenstrom \dot{m} berechnet

$$\dot{m} = f \cdot \rho_{0,tot} \sqrt{2 \frac{p_{0,tot}}{\rho_{0,tot}}} \psi_{max}. \quad (5.5)$$

Hier ist f die Querschnittsfläche des Düsenaustritts, $\rho_{0,tot}$ die Totaldichte, $p_{0,tot}$ der Totaldruck und ψ_{max} der Maximalwert der Durchflussfunktion. Mit Kenntnis des Düsenmassenstroms \dot{m} wird die Geschwindigkeit w_0 am Düseneintritt durch

$$w_0 = \frac{4\dot{m}}{D^2 \pi \rho_0} \quad (5.6)$$

berechnet, wobei sich die statische Dichte ρ_0 am Düseneintritt durch die thermische Zustandsgleichung idealer Gase ermittelt

$$\rho_0 = \frac{p_0}{RT_0}. \quad (5.7)$$

Mit T_0 der statischen Temperatur am Düseneintritt wird ebenfalls ein Startwert für die iterative Berechnung der Randbedingungen vorgegeben. p_0 ist der statische Düsenvordruck. In weiterer Folge errechnet sich die Mach-Zahl M_0 im Düseneintritt durch das Verhältnis von Strömungsgeschwindigkeit zu Schallgeschwindigkeit an dieser Stelle.

$$M_0 = \frac{w_0}{\sqrt{\kappa RT_0}} \quad (5.8)$$

Für das Verhältnis von Totaltemperatur $T_{0,tot}$ zu statischer Temperatur T_0 gilt der Zusammenhang [8]

$$\frac{T_{0,tot}}{T_0} = 1 + \frac{\kappa - 1}{2} M_0^2, \quad (5.9)$$

mit dem die statische Temperatur T_0 am Düseneintritt bestimmt werden kann. Ferner gilt im Falle isentroper Zustandsänderung für das Verhältnis von Totaldruck $p_{0,tot}$ zu statischem Druck p_0

$$\frac{p_{0,tot}}{p_0} = \left[1 + \frac{\kappa - 1}{2} M_0^2 \right]^{\frac{\kappa}{\kappa - 1}}. \quad (5.10)$$

Damit lässt sich der Totaldruck $p_{0,tot}$ bestimmen, der als Randbedingung vorzugeben ist. Die iterative Berechnung der Randbedingungen wurde in einem Tabellenkalkulationsprogramm durchgeführt, die mit einer zur Verfügung stehenden Solver-Operation gelöst werden konnte, indem die Startwerte $p_{0,tot}$ und T_0 mit den neu berechneten Werten für $p_{0,tot}$ und T_0 aus Gl. (5.10) und (5.9) gleichgesetzt werden und so eine Lösung gesucht wird. Die kritische Geschwindigkeit w_k am Düsenaustritt berechnet sich durch

$$w_k = \sqrt{2 \frac{p_{0,tot}}{\rho_{0,tot}} v_k}, \quad (5.11)$$

mit v_k dem kritischen Wert der Geschwindigkeitsfunktion

$$v_k = \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa + 1}}. \quad (5.12)$$

Die kritische Geschwindigkeit w_k (=Austrittsgeschwindigkeit) und der Massenstrom \dot{m} der konvergenten Düse sind nur vom Ruhezustand von $\rho_{0,tot}$ und $p_{0,tot}$ abhängig. Obwohl der Gegendruck p_1 unter dem Niveau des kritischen Drucks

liegt, ergibt sich keine Erhöhung des Massenstromes mehr, und die Strömungsgeschwindigkeit im Austritt kann nicht über Schallgeschwindigkeit ansteigen. Die Ergebnisse der Berechnung der Randbedingungen und der Düsenströmung sind in Tabelle 2 aufgelistet.

Tabelle 2: Ergebnisse der Berechnung der Randbedingungen und der Düsenströmung.

Totaldruck $p_{0,tot}$	401106 Pa
Totaltemperatur $T_{0,tot}$	455.7K
Massenstrom \dot{m}	7.33e-03 kg/s
Düseneintritt	
Eintrittsdruck p_0	400000 Pa
Eintrittstemperatur T_0	455.4K
Eintrittsgeschwindigkeit w_0	34.1 m/s
Düsenaustritt	
Kritischer Druck p_k	218895 Pa
Kritische Temperatur T_k	396.3K
Kritische Geschwindigkeit w_k	487.6 m/s

In Abbildung 15 sind die Verläufe der dimensionslosen Strömungsgrößen m^* , p^* , T^* und w^* der Düsenströmung in Abhängigkeit vom statischen Düsenvordruck p_0 eingetragen. Die Referenzwerte \dot{m}_{ref} , $p_{k,ref}$, $p_{0,tot,ref}$, $p_{0,ref}$, sowie $T_{k,ref}$, $T_{0,tot,ref}$, $T_{0,ref}$ und $w_{k,ref}$, $w_{0,ref}$ werden beim Eintrittsdruck $p_0=4$ bar (=statischer Düsenvordruck) berechnet. Die Referenzwerte sind die in Tabelle 2 zusammengestellten Werte.

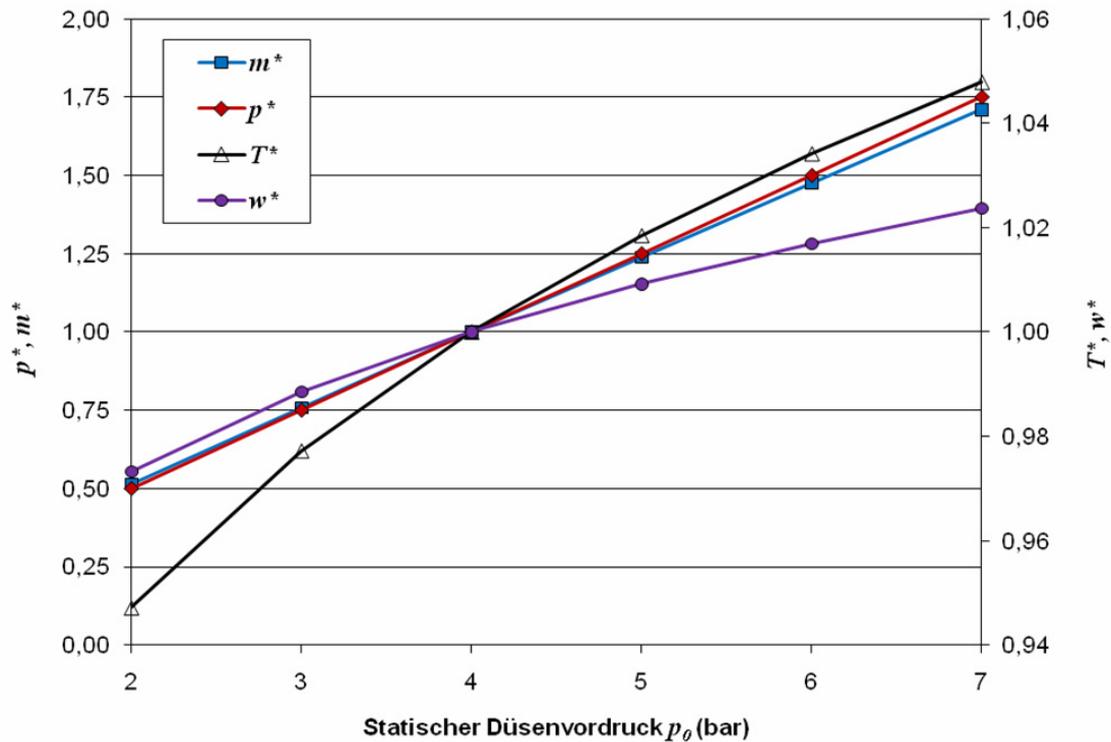


Abbildung 15: Verläufe der dimensionslosen Größen m^* , p^* , T^* und w^* der Düsenströmung in Abhängigkeit vom statischen Düsenvordruck p_0 .

Die dimensionslosen Größen der Düsenströmung m^* , p^* , T^* und w^* beschreiben die Verhältnisse:

$$m^* = \frac{\dot{m}}{\dot{m}_{ref}}, \quad (5.13)$$

$$p^* = \frac{p_k}{p_{k,ref}} = \frac{p_{o,tot}}{p_{o,tot,ref}} = \frac{p_o}{p_{o,ref}}, \quad (5.14)$$

$$T^* = \frac{T_k}{T_{k,ref}} = \frac{T_{o,tot}}{T_{o,tot,ref}} = \frac{T_o}{T_{o,ref}}, \quad (5.15)$$

$$w^* = \frac{w_k}{w_{k,ref}} = \frac{w_0}{w_{0,ref}}. \quad (5.16)$$

Da im Betriebsbereich von $p_0=2$ bis 7 bar überkritisches Druckverhältnis vorliegt, wird im Düsenaustritt die Mach-Zahl $M_k=1$ erreicht. Weiterhin beträgt die Mach-Zahl $M_0=0.065$ im Düseneintritt für den gesamten Betriebsbereich. Da im vorlie-

genden Fall der Gegendruck p_1 hinter der konvergenten Düse unter dem kritischen Druck p_k liegt, muss es zu einer Nachexpansion des Gasstrahls kommen, die durch lokale Überschallbereiche erreicht wird. Im folgenden Abschnitt wird der sich ausbildende Freistrah nach Austritt des Gases aus der Düse betrachtet.

5.2.2 Freistrah

Nach dem Austritt aus der Düse erfolgt die Expansion des Wasserdampf-Strahls auf den Gegendruck p_1 . Durch die folgende Berechnung soll die Überschallgeschwindigkeit im düsennahen Bereich bestimmt werden. In Abbildung 16 ist die Skizze des Freistrahls dargestellt, die der folgenden Berechnung zugrunde liegt.

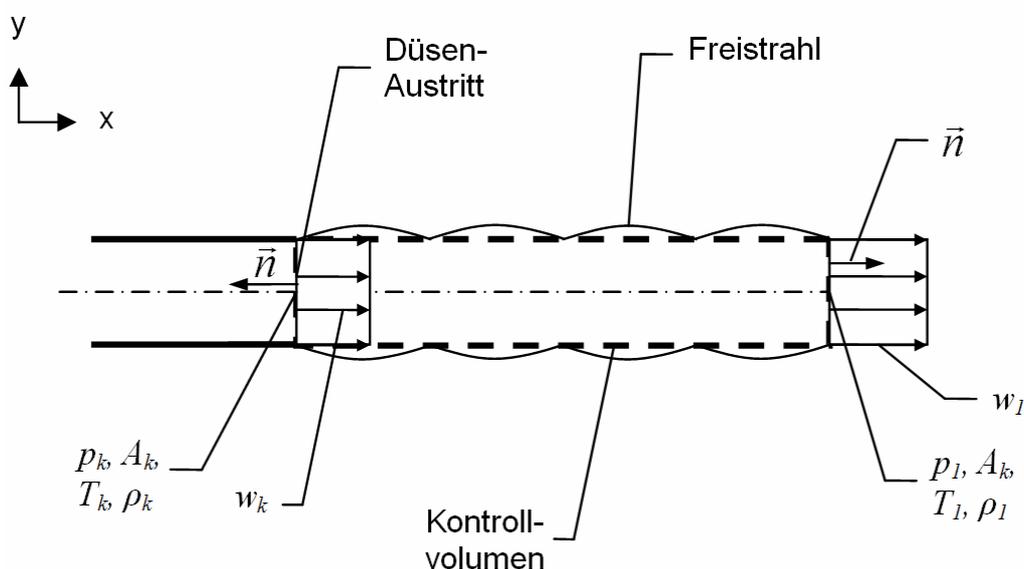


Abbildung 16: Skizze zur Abschätzung der Geschwindigkeit im Freistrah.

Der Zustand 1 befindet sich in einiger Entfernung von der Düsenmündung im Freistrah, wo die Geschwindigkeit w_1 berechnet wird. Zur Abschätzung der Geschwindigkeit im Freistrah wird der Impulssatz betrachtet. Der Impulssatz wird an dem skizzierten Kontrollvolumen angesetzt. In der Düsenmündung erreicht der Dampfstrahl die kritische Geschwindigkeit w_k und den kritischen Druck p_k . Im Kessel erfolgt schließlich eine weitere Expansion auf den Gegendruck p_1 [5]. Die Impulsgleichung lautet in differentieller Form für volumenkrafftfreie und reibungsfreie Strömung [8]

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \right] = -\vec{\nabla} p. \quad (5.17)$$

Der Impulserhaltungssatz in x-Richtung, der aus Gl. (5.17) durch Integration über das Kontrollvolumen hervorgeht, lautet gemäß Abbildung 16 für stationäre Strömung

$$w_k \cdot (-\rho_k w_k) \cdot A_k + w_1 \cdot (\rho_1 w_1) \cdot A_k = (p_k - p_1) \cdot A_k. \quad (5.18)$$

Die kritischen Größen im Austrittsquerschnitt der Düse wurden bereits in Abschnitt 5.2.1 ermittelt. Durch Berücksichtigung der Massenerhaltung ergibt sich für die Geschwindigkeit w_1 im Freistrah in der Nähe der Düsenmündung

$$w_1 = w_k + \frac{p_k - p_1}{w_k \cdot \rho_k}. \quad (5.19)$$

Der Wert der Geschwindigkeit w_1 im Freistrah beträgt 691.3 m/s. Um die Mach-Zahl M_1 im Freistrah zu bestimmen, die im Abschnitt 5.5.4.2 mit dem Wert der CFD-Simulation verglichen wird, muss zunächst die Schallgeschwindigkeit c_1 an diese Stelle berechnet werden. Die Temperatur T_1 an der Stelle 1 im Freistrah berechnet sich für isentrope Zustandsänderungen idealer Gase durch den Zusammenhang

$$\frac{T_1}{T_k} = \left(\frac{p_1}{p_k} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \quad (5.20)$$

und hat für die betreffenden Größen den Wert $T_1 = 330.7\text{K}$. Die Schallgeschwindigkeit c_1 berechnet sich durch

$$c_1 = \sqrt{\kappa R T_1} \quad (5.21)$$

Die Schallgeschwindigkeit c_1 hat den Wert $c_1 = 445.4$ m/s. Die Mach-Zahl M_1 berechnet sich aus dem Verhältnis von Freistrahlgeschwindigkeit w_1 zu Schallgeschwindigkeit c_1 an der Stelle 1 und beträgt $M_1 = 1.55$. Es sei darauf hingewiesen, dass das vereinfachte Geschwindigkeitsprofil im Freistrah, wie in Abbildung 16 dargestellt ist, in der Realität nicht vorliegt. Für detaillierte Berechnungen zur Abbildung des definierten Geschwindigkeitsprofils von unterexpandierten Freistrahlen nach dem Charakteristikenverfahren wird auf Rist [38] verwiesen.

5.3 Beurteilung der Rauchgasströmung durch Kennzahlen

In diesem Abschnitt erfolgt eine Beurteilung der Rauchgasströmung anhand dimensionsloser Kennzahlen, um u.a den Einfluss der Schwerkraft, sowie die Bedeutung von Auftriebskräften auf die Strömungssituation aufzuzeigen. Dabei wird die seitliche Eindüsung nicht in Betracht gezogen. Die Angaben für die Beurteilung der Rauchgasströmung sind in Tabelle 3 zusammengestellt.

Tabelle 3: Angaben für die Beurteilung der Rauchgasströmung.

Rauchgaseintritt	
Mittlere Geschwindigkeit \bar{U}	3.1 m/s
Totaltemperatur T_{RG}	900°C
Hydraulischer Durchmesser D_H	6.9 m
Stickstoff N_2 ¹	
Wärmeausdehnungskoeffizient β	0.85e-03 K ⁻¹
Kinematische Viskosität ν	161e-06 m ² /s
Spezifische Wärmekapazität c_p	1.2 kJ/kgK
Wärmeleitfähigkeit λ	0.075 W/mK
Kesselwand	
Temperatur an der Außenseite $T_{W,a}$	269°C
Wandstärke s	36.9 mm
Wärmeleitfähigkeit λ_w	6.33 W/mK

Auf die physikalische Bedeutung der Reynolds-Zahl Re wurde bereits im Abschnitt 3.2 eingegangen. Sie ist sinngemäß das Verhältnis von Trägheitskräften zu Zähigkeitskräften und berechnet sich durch [9]

$$Re = \frac{\bar{U} \cdot L}{\nu} \quad (5.22)$$

In diesem Fall ist \bar{U} die volumenstromäquivalente Rauchgaseintrittsgeschwindigkeit. ν ist die kinematische Viskosität des Fluids, und L ist die charakteristische Länge, für die der hydraulische Durchmesser D_H des gesamten Kesselquerschnitts herangezogen wird. Die Reynolds-Zahl hat für den vorliegenden Fall den Wert $1.3e+05$, das bedeutet, dass die Strömung turbulent ist ($Re_{krit} \approx 2300$ für Rohr- und Kanalströmungen). Die Froude-Zahl Fr ist eine weitere dimensionslo-

¹ Für die Abschätzung wurden die Stoffwerte von Stickstoff bei 1 bar und 900°C herangezogen.

se Kennzahl für die Charakterisierung von fluiden Systemen. Sie gibt das Verhältnis von Trägheitskraft zu Schwerkraft [44] an.

$$Fr = \frac{\bar{U}}{\sqrt{g \cdot L}} \quad (5.23)$$

g ist die Erdbeschleunigung. Als charakteristische Länge L wird wieder der hydraulische Durchmesser D_H eingesetzt. Die Froude-Zahl hat für diese Strömungssituation den Wert 0.38. Da der Massenkraftterm in den dimensionslos formulierten Navier-Stokes-Gleichungen durch das Quadrat dieser dividiert wird, ist auch unter dieser Betrachtung, die keine Kopplung des Geschwindigkeitsfeldes mit dem Temperaturfeld berücksichtigt, die Massenkraft für eine korrekte Impulsbilanz wichtig. Die Grashof-Zahl Gr ist eine dimensionslose Kennzahl, die das Verhältnis von Auftriebskräften zu Zähigkeitskräften angibt und sich durch den Zusammenhang [9]

$$Gr = \frac{g\beta(T_{RG} - T_{W,i})L^3}{\nu^2} \quad (5.24)$$

berechnen lässt. Hierin ist g die Erdbeschleunigung, β der isobare Ausdehnungskoeffizient des fluiden Mediums, und $T_{RG} - T_{W,i}$ die Temperaturdifferenz zwischen der als Randbedingung festgesetzten Fluidtemperatur am Rauchgaseintritt und der Temperatur an der Wandinnenseite. ν ist die kinematische Viskosität der Rauchgase. Als charakteristische Länge L wird der hydraulische Durchmesser D_H des Kessels eingesetzt. Die unbekannte Temperatur an der Wandinnenseite $T_{W,i}$ berechnet sich durch Abschätzen der Wärmestromdichte q , für die gilt

$$q = \frac{T_{RG} - T_{W,a}}{\frac{1}{\alpha_i} + \frac{s}{\lambda_w}} \quad (5.25)$$

α_i ist der Wärmeübertragungskoeffizient an der Wandinnenseite, für den zur Abschätzung der Wert $200 \text{ W/m}^2\text{K}$ herangezogen wird, welcher der Produktinformation für Feuerfestabkleidungen für Müllheizkraftwerken und Biomasseverbrennungsanlagen [21] entnommen ist. s und λ_w sind die als Randbedingungen festgesetzte Wandstärke und die Wärmeleitfähigkeit der Kesselwand. Für den vorliegenden Fall ergibt sich $q = 58261 \text{ W/m}^2$. Drückt man nun die berechnete Wärmestromdichte durch folgende Beziehung aus

$$q = \lambda_w \frac{T_{W,i} - T_{W,a}}{s}, \quad (5.26)$$

so lässt sich die Temperatur an der Wandinnenseite $T_{W,i}$ berechnen. $T_{W,i}$ beträgt nach dieser Rechnung 609°C . In weiterer Folge ergibt sich nach Gl. (5.24) $Gr = 3.1 \times 10^{10}$. Aufgrund von Dichteunterschieden in der Rauchgasströmung infolge von Temperaturgradienten kann die Strömung durch Einwirkung der Schwerkraft auf das Fluid beeinflusst werden – Auftrieb kann in Erscheinung treten. Eine Aussage über die Bedeutung der Auftriebskräfte in einer Strömung kann durch das Verhältnis der Grashof-Zahl zum Quadrat der Reynolds-Zahl getroffen werden.

$$\frac{Gr}{Re^2} = \frac{g\beta\Delta TL}{v^2} \quad (5.27)$$

Abhängig vom Wert dieses Verhältnisses können folgende Aussagen getroffen werden [44]:

- $\frac{Gr}{Re^2} \ll 1$: Erzwungene Konvektion (Auftriebskräfte \ll Trägheitskräfte).
- $\frac{Gr}{Re^2} \gg 1$: Freie Konvektion (Auftriebskräfte \gg Trägheitskräfte).
- $\frac{Gr}{Re^2} \approx 1$: Erzwungene und freie Konvektion (Auftriebskräfte \approx Trägheitskräfte).

$\frac{Gr}{Re^2}$ hat für das vorliegende Problem den Wert 1.8. Somit sind Auftriebskräfte und Trägheitskräfte von gleicher Größenordnung, und es liegt gemischte Konvektion vor, die sich aus freier und erzwungener Konvektion zusammensetzt. Die Eckert-Zahl Ec gibt das Verhältnis von kinetischer Energie zur Enthalpiedifferenz der thermisch beeinflussten Zone an und berechnet sich durch [9]

$$Ec = \frac{\bar{U}^2}{c_p (T_{RG} - T_{W,i})}. \quad (5.28)$$

c_p ist die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck. Die Eckert-Zahl hat für die vorliegende Strömung den Wert $2.8e-05$. Das heißt, dass der Kompressionsarbeit, ebenso wie dem dissipativen Verlust an mechanischer Energie in diesem Strömungsvorgang keine Bedeutung zukommt. Mit der Prandtl-Zahl Pr kann in laminarer Strömung das Verhältnis δ_t/δ der Dicken der Temperatur- und der Geschwindigkeitsgrenzschicht bestimmt werden. Die Prandtl-Zahl gibt physikalisch das Verhältnis der Diffusivitäten von Impuls und Enthalpie an. Auf die Prandtl-Zahl wurde in Abschnitt 3.3.2 bereits näher eingegangen. Sie sei hier noch einmal angeführt [9].

$$Pr = \frac{\mu \cdot c_p}{\lambda} \quad (5.29)$$

Die Prandtl-Zahl hat für diesen Fall den Wert 0.74, so dass also die Temperatur- und die Geschwindigkeitsgrenzschicht auch in laminarer Strömung näherungsweise gleich dick sind. Die Abschätzung der Wärmeübertragungszahl α erfolgt durch folgende Beziehung nach Colburn zitiert von Brenn [9]

$$Nu = \frac{\alpha D}{\lambda} = 0.023 Re^{4/5} Pr^{1/3}. \quad (5.30)$$

Diese Beziehung ist gültig für thermisch voll entwickelte Strömungen, von denen hier näherungsweise ausgegangen wird. Aus Gl. (5.30) errechnet sich der Wert

$\alpha = 2.84 \text{ W/m}^2\text{K}$. Der niedrige Wert der Wärmeübertragungszahl deutet auf einen geringen Anteil der Wärmeübertragung durch Konvektion am gesamten übertragenen Wärmestrom hin. Multipliziert mit der Temperaturdifferenz der Fluidtemperatur T_{RG} am Rauchgaseintritt und der Temperatur an der Wandinnenseite $T_{W,i}$ ergibt sich eine konvektive Wärmestromdichte von 828 W/m^2 .

5.4 Geometrie und Randbedingungen

Um den Rechenaufwand einzugrenzen, wird vom realen Kessel nur ein Segment berechnet. An der vereinfachten Geometrie wird die Untersuchung des Eindüsungsvorgangs durchgeführt. Im Folgenden wird die vereinfachte Geometrie als Testgeometrie bezeichnet. In Abbildung 17 ist das Berechnungsgebiet im Kessel – die Testgeometrie – schematisch dargestellt.

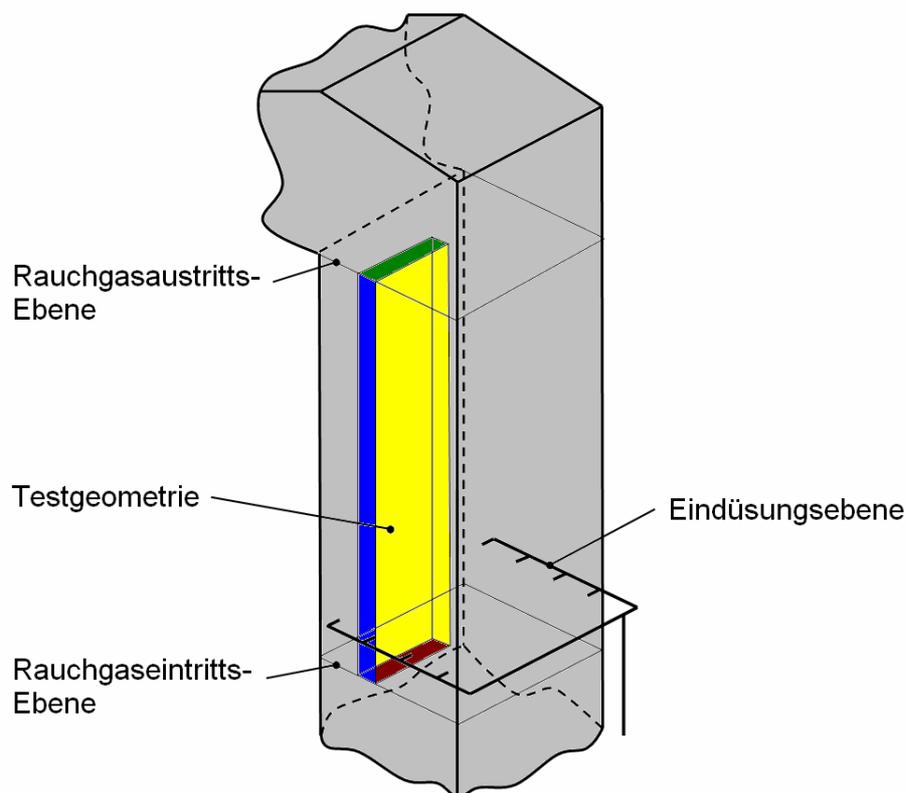


Abbildung 17: Berechnungsgebiet im Kessel – Testgeometrie (schematische Darstellung).

5.4.1 Geometrie

In Abbildung 18 ist das verwendete Rechenetz dargestellt, das mit dem Preprocessing-Code Gambit erstellt wurde.

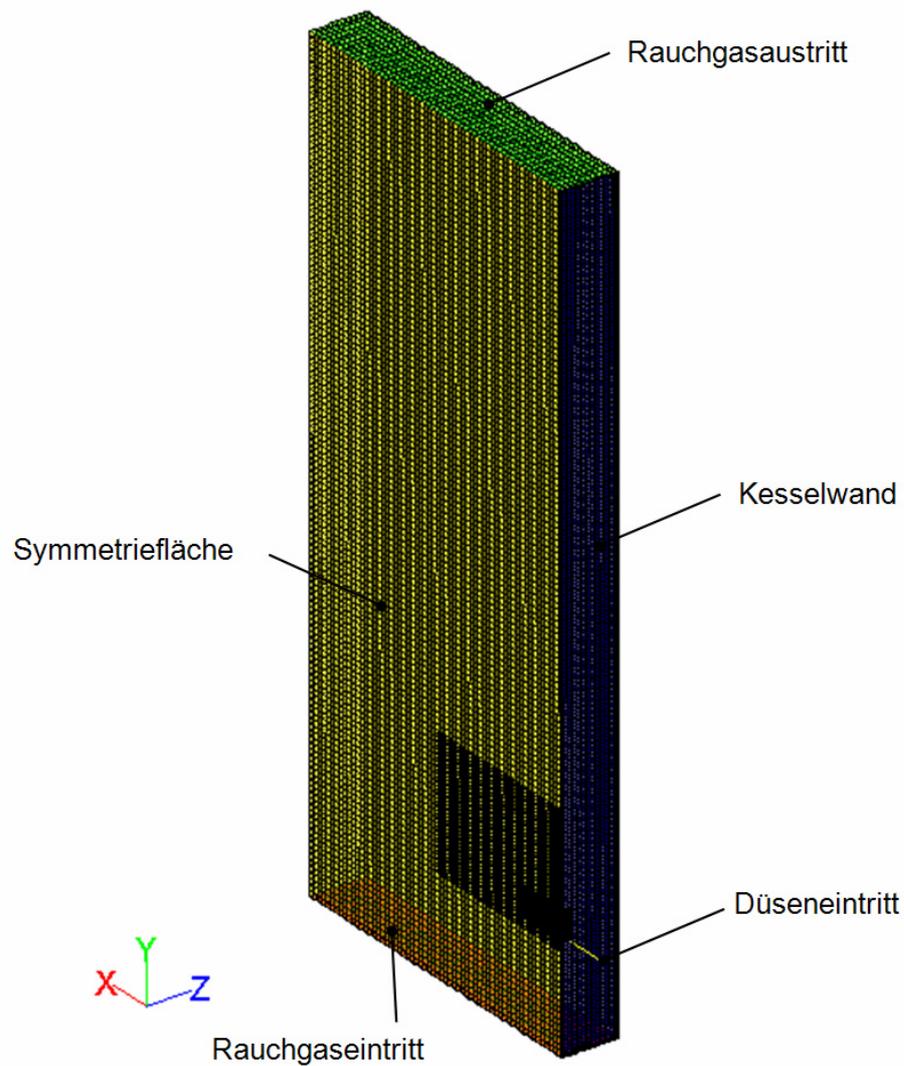


Abbildung 18: Testgeometrie für die CFD-Simulationen.

Das Rechengebiet setzt sich aus zwei Teilen – Kesselsegment und Düse – zusammen. Die Verbindungsfläche der beiden Teile bildet ein Interface, dessen Besonderheit es ist, dass die gekoppelten Flächen keine gemeinsamen Knotenpunkte besitzen müssen. Dies ermöglicht erst die Erstellung eines effizienten Rechengebiets mit relativ geringer Zellenanzahl und qualitativ anspruchsvollen Zellen. In Tabelle 4 sind die geometrischen Abmessungen des Rechengebiets aufgelistet.

Tabelle 4: Geometrische Abmessungen der Testgeometrie.

Kesselsegment

Gesamthöhe	7000 mm
Breite	3000 mm
Tiefe	500 mm

Düse²

Düsenlänge	520 mm
Eintrittsdurchmesser D	12 mm
Austrittsdurchmesser d	4 mm
Lage der Eindüsungsstelle y	1000 mm

Die Düsenlängsachse steht bei allen durchgeführten Simulationen normal auf die Kesselwand und liegt auf der Höhe $y=1$ m. In Abbildung 19 ist das Rechengitter im düsennahen Bereich dargestellt.

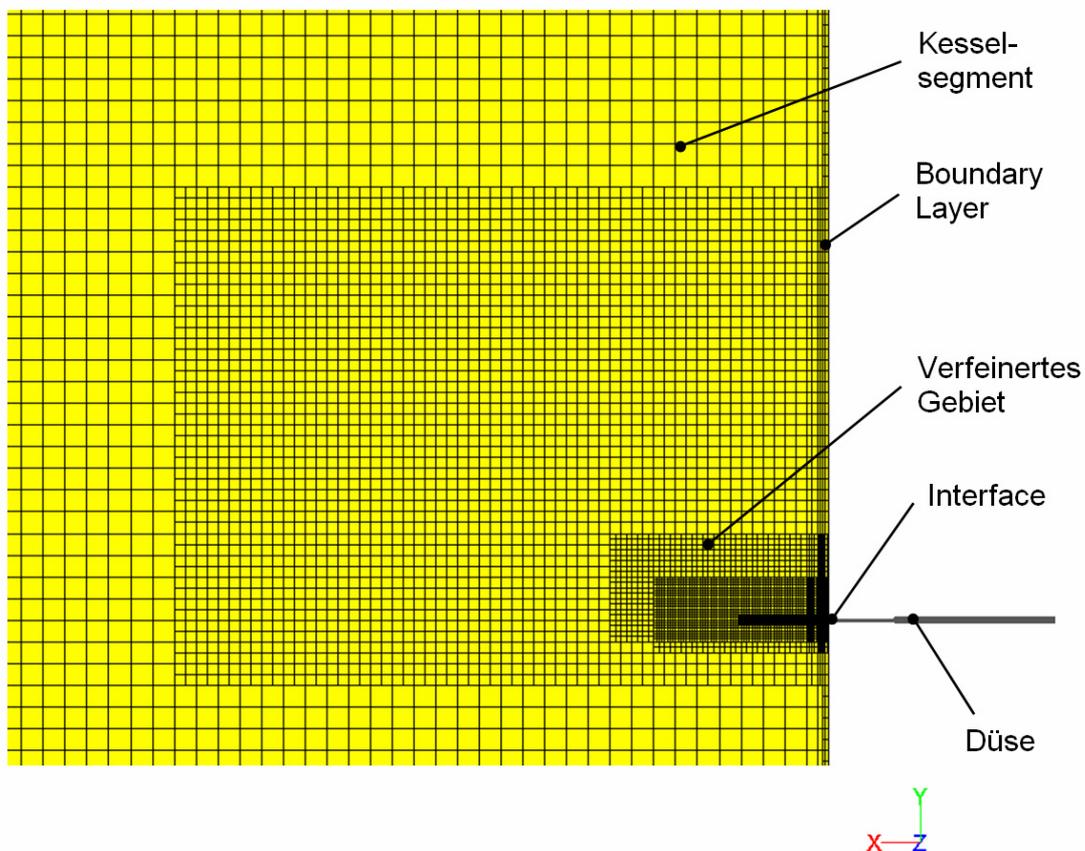


Abbildung 19: Rechengitter im düsennahen Bereich.

² Durch Ausnützen der Symmetrieeigenschaften wird die Düse im Längsschnitt geteilt und nur eine Hälfte modelliert.

Die hohe numerische Auflösung im düsen nahen Bereich ist erforderlich, da lokal hohe Geschwindigkeits- und Druckgradienten auftreten. Aufgrund der Größe des Kesselsegments können die feinen Zellen nur in Bereichen eingesetzt werden, wo hohe Gradienten der Strömungsgrößen auftreten. Um den wandnahen Bereich numerisch aufzulösen, wird das Rechengitter an der Kessel- und Düsenwand mit Hilfe von Boundary Layern erstellt. Im düsen nahen Bereich des Kesselsegments sind mit der Option „Adapt Region“ des Simulationsprogrammes Fluent 12.0, innerhalb des Bereichs $x = -0.02$ bis 1.5 m, $y = 0.85$ bis 2 m und $z = 0$ bis 0.2 m Zellen verschieden oft verfeinert worden. In der Region, wo sich der unterexpandierte Hochdruck-Freistrahel ausbildet, ist das Rechengitter besonders stark adaptiert. Aus einer ursprünglichen Zelle entstehen je Verfeinerungsschritt acht neu gebildete Zellen. Das Interface koppelt die beiden Zell-Zonen – Düse und Kesselsegment – miteinander, ohne dass gemeinsame Knotenpunkte der benachbarten Zellen vorliegen müssen. Dies ist in Abbildung 20 detaillierter veranschaulicht.

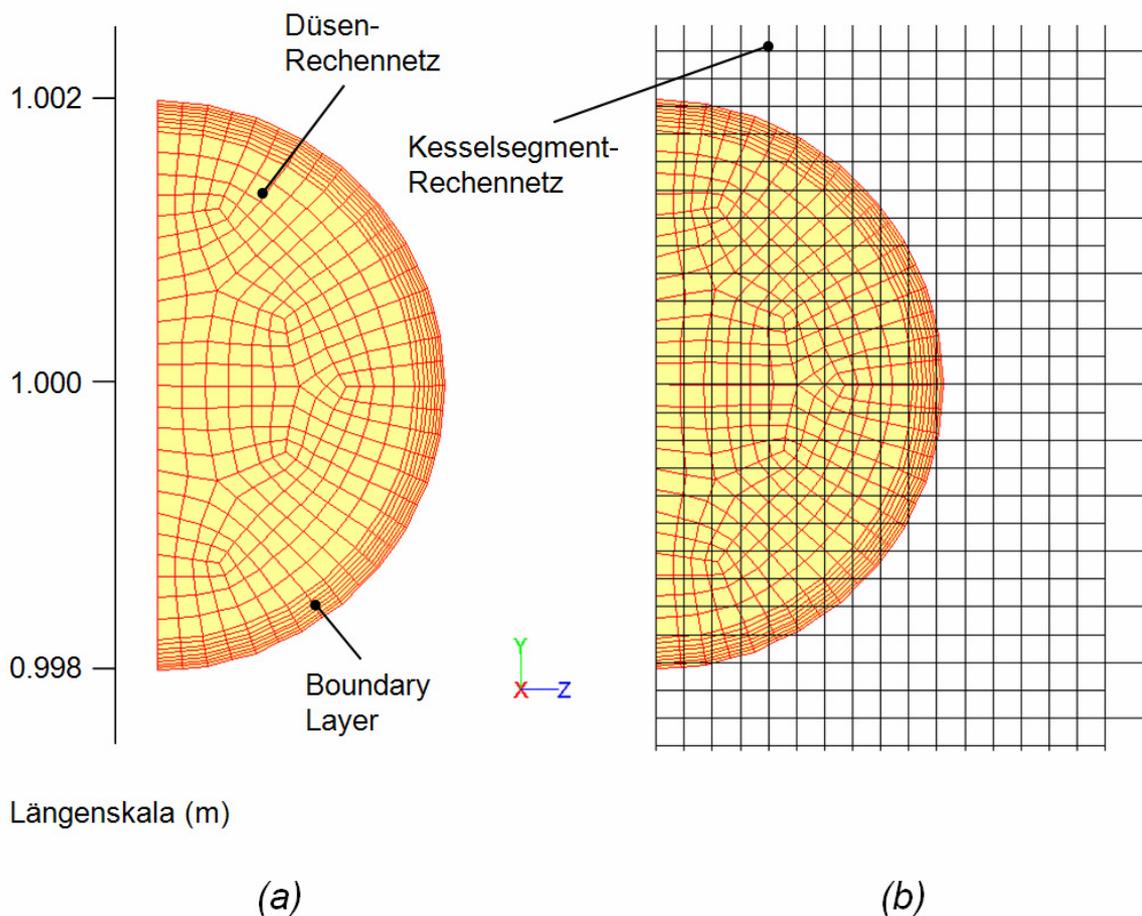


Abbildung 20: (a) Struktur des Rechnetzes am Düsenaustritt, (b) Gekoppeltes Rechengetz der Düse und des Kesselsegments durch das Interface.

Grundsätzlich wurden Simulationen mit zwei verschiedenen Rechennetzen durchgeführt, einem groben und einem feinen Rechennetz. Letzteres unterscheidet sich von dem groben darin, dass im Wandbereich des Kessels und der Düse numerisch höher aufgelöst wurde. Die Ergebnisse zeigten, dass sich die relevanten Größen, beispielsweise für den Wärmeübergang, zwischen den beiden Netzen nicht mehr veränderten. Daher wurden weitere Simulationen für Parameterstudien mit dem Rechennetz der geringeren Zellenanzahl durchgeführt. Wichtige Qualitätsmerkmale die nachfolgend noch näher diskutiert werden, sowie die Anzahl der Zellen der zusammengesetzten Rechennetze, sind Tabelle 5 zu entnehmen.

Tabelle 5: Zellenanzahl und Qualitätsmerkmale der Rechennetze.

Grobes Rechennetz	
Anzahl der Zellen	6.4e+05
Maximum Cell Squish	6.67e-01
Maximum Aspect Ratio	1.91e+01
Feines Rechennetz	
Anzahl der Zellen	1.1e+06
Maximum Cell Squish	6.67e-01
Maximum Aspect Ratio	1.91e+01

Definition der Qualitätsmerkmale

Das sogenannte Aspect Ratio ist ein Maß für die Streckung einer Zelle und berechnet sich nach [3] als Verhältnis von Maximalwert zu Minimalwert der Abstände vom Zellmittelpunkt zu den Flächenmittelpunkten und der Abstände vom Zellmittelpunkt zu den Eckpunkten. An der folgenden Prinzipskizze berechnet sich das Aspect Ratio beispielsweise mit A/B .

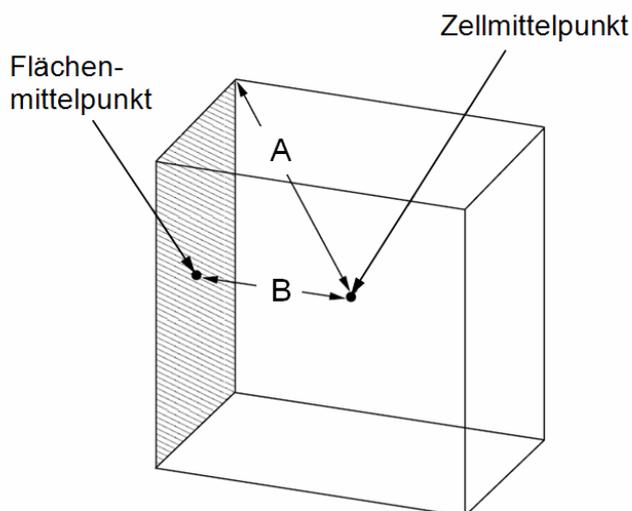


Abbildung 21: Prinzipskizze zur Bestimmung des Aspect Ratios am Hexaeder [3].

Cell Squish ist ein weiteres Qualitätsmerkmal für Zellen. Der Maximalwert berechnet sich aus den Skalarprodukten der Vektoren aus dem Zellzentrum zu den Mittelpunkten der Flächen und den zugehörigen Normalvektoren der Flächen durch

$$\max_i \left[1 - \frac{\vec{A}_i \cdot \vec{r}_{e0/xf_i}}{|\vec{A}_i| |\vec{r}_{e0/xf_i}|} \right]. \quad (5.31)$$

5.4.2 Randbedingungen und Modelle

In diesem Abschnitt werden die Randbedingungen und Modelle, sowie weitere Einstellungen des Simulationssettings vorgestellt.

5.4.2.1 Randbedingungen

In Tabelle 6 sind die Randbedingungen der CFD-Simulationen mit 3 und 4 bar Düsenovordruck (absolut) zusammengestellt. Die als Randbedingung vorzugebende Zusammensetzung des Wasserdampf-Ammoniak-Gemisches am Düsen Eintritt ist bei 3 und 4 bar Düsenovordruck verschieden. Sie wurde so berechnet, dass in beiden Fällen die gleiche Menge Ammoniak zugeführt wird. Die Berechnung der Zusammensetzung wird mit einer Erweiterung des erstellten Excel-Tools für die Berechnung der Randbedingungen durchgeführt, indem der Eindüsungsvorgang eines Wasserdampf-Ammoniak-Gemisches der eindimensionalen isentropen Strömung berechnet wird. Ein Vergleich der zugeführten Ammoniak-Massenströme

der Simulationen mit 3 und 4 bar Düsenvordruck ergibt eine Übereinstimmung von 99%.

Tabelle 6: Randbedingungen der Simulationen.

Rauchgaseintritt		
Massenstrom \dot{m}_{RG}		1.38 kg/s
Totaltemperatur T_{RG}		900°C
Turbulente Intensität I		3.66%
Hydraulischer Durchmesser D_H		6.9 m
Massenanteile		
Kohlendioxid w_{CO_2}		0.153121
Sauerstoff w_{O_2}		0.071590
Stickstoff w_{N_2}		0.670262
Stickstoffmonoxid w_{NO}		0.000199
Wasser w_{H_2O}		0.104828
Düseneintritt		
Totaldruck ³ $p_{0,tot}$		299781/199487 Pa
Totaltemperatur $T_{0,tot}$		178/165°C
Turbulente Intensität I		4.71%
Hydraulischer Durchmesser D_H		0.012 m
Massenanteile		
Ammoniak w_{NH_3}		0.0645/0.0846
Wasser w_{H_2O}		0.9355/0.9154
Rauchgasaustritt		
Statischer Druck ³ p_A		0 Pa

Am Rauchgaseintritt stellt sich aufgrund der Randbedingungen in Tabelle 6 eine Strömungsgeschwindigkeit von 3.1 m/s ein. Die Eindringtiefe des Wasserdampf-

³ Totaldruck und statischer Druck werden relativ zum Betriebsdruck (101325 Pa) vorgegeben.

Ammoniak-Strahls – und damit auch die Ammoniak-Verteilung im Kessel – ist naturgemäß auch von der Rauchgasgeschwindigkeit abhängig, da die Rauchgasströmung den Gasstrahl in Querrichtung anströmt und dadurch ablenkt. Die Randbedingungen für die Kesselwand sind in Tabelle 7 aufgelistet.

Tabelle 7: Randbedingungen für die Kesselwand.

Kesselwand	
Emissionskoeffizient der Wandinnenseite ε_W	0.78
Dichte ρ_W	2600 kg/m ³
Spezifische Wärmekapazität $c_{p,W}$	1000 J/kgK
Temperatur der Wandaußenseite $T_{W,a}$	269°C
Wandstärke s	36.9 mm
Wärmeleitfähigkeit λ_W	6.33 W/mK

5.4.2.2 Modelle und Einstellungen

In Tabelle 21 sind weitere Einstellungen und Modelle des Simulationssettings zusammengestellt.

Tabelle 8: In der CFD-Simulation eingesetzte Modelle und Einstellungen.

Absorptionskoeffizienten a	WSGGM (domain-based)
Dichteberechnung	thermische Zustandsgleichung idealer Gase
Gravitationsfeld	vorgegeben ($y = -9.81 \text{ m/s}^2$)
Strahlungsmodell	P1-Modell
Turbulenzmodell	Realizable k, ε -Modell

Für eine möglichst stabile Berechnung mit akzeptabler Konvergenzgeschwindigkeit hat sich die Option „Solution Steering“ als hilfreich erwiesen. Dabei wurde die maximale Courant-Zahl mit zehn begrenzt und der Explicit Under-Relaxation Factor mit 0.5 vorgegeben. Ferner wurde der Flow Type als transonisch gewählt. Die

Courant-Zahl wird mit dieser Methode gegebenenfalls selbständig verändert, falls dies während des Berechnungsablaufs erforderlich ist, beispielsweise beim Erreichen des Turbulent Viscosity Ratio Limits.

5.5 Ergebnisse

In Tabelle 9 ist ein Vergleich der Ergebnisse der CFD-Simulation und der Handrechnung für die berechnete Düsenströmung zusammengestellt. Die Berechnungen wurden mit 4 bar Düsenvordruck durchgeführt.

Tabelle 9: Vergleich der Ergebnisse der CFD-Simulation und der Handrechnung der berechneten Düsenströmung am Düsenaustritt.

Größe	CFD-Simulation	Handrechnung	Differenz ⁴
\dot{m}	6.62e-03 kg/s	7.33e-03 kg/s	-10%
p_k	183325 Pa	218895 Pa	-16%
T_k	396.0K	396.3K	0%
w_k	528.1 m/s	487.6 m/s	8%

5.5.1 Profile des Ammoniak-Massenanteils

Zur besseren Veranschaulichung der Ergebnisse, wie z.B. der Eindringtiefe, werden in den folgenden Contourplots vier Kesselsegmente abgebildet. Die Beschreibungen beziehen sich teils auf ein Kesselsegment (=Testgeometrie), gelten aus Symmetriegründen spiegelbildlich auch für die anderen drei Segmente. Die vorliegenden Contourplots in diesem Abschnitt basieren auf den Randbedingungen 4 bar Düsenvordruck und 900°C Rauchgasaustrittstemperatur. In Abbildung 22 ist das Profil des Ammoniak-Massenanteils im Vertikalschnitt durch die Düsen mit Geschwindigkeitsvektoren abgebildet.

⁴ Die Differenz gibt die Abweichung der Ergebnisse der CFD-Simulation zur Handrechnung an.

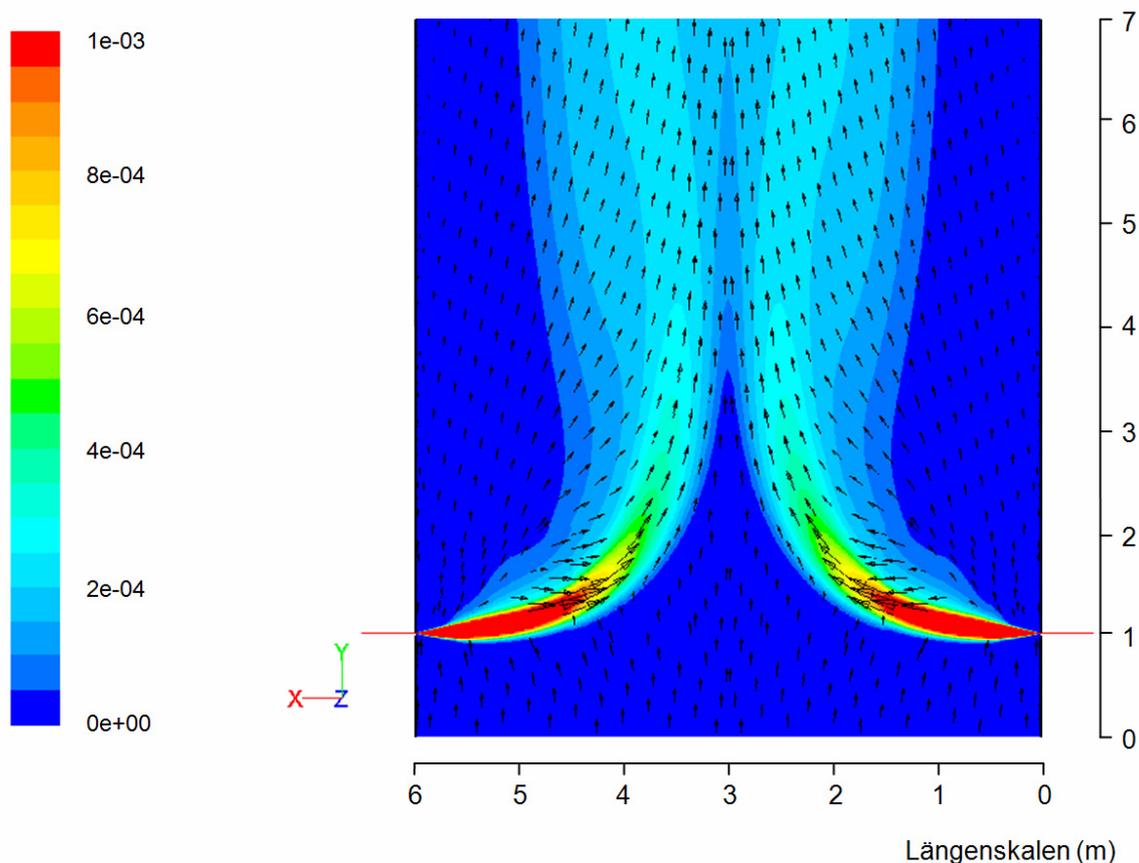


Abbildung 22: Profil des Ammoniak-Massenanteils im Vertikalschnitt in der Symmetrieebene bei $z=0$ m mit Geschwindigkeitsvektoren.

Im Bereich des Eindüsungsstrahls wurde aus Gründen der Übersichtlichkeit auf die Darstellung der Vektoren der Absolutgeschwindigkeit verzichtet. Der Eindüsungsstrahl des Wasserdampf-Ammoniak-Gemisches weist hohe Massenanteile des beigemengten Reduktionsmittels Ammoniak von über 1000 ppm in einem Bereich auf, der vom Düsenaustritt bis zirka 1.7 m in den Kesselraum hinein reicht. Die veranschaulichte gegenüberliegende Eindüsung zeigt, dass das zugeführte Reduktionsmittel in einer Höhe von rund 2.6 m über der Eindüsungsstelle die Kesselmitte erreicht. Es sei hier nochmals darauf hingewiesen, dass die Düsenlängsachse bei allen durchgeführten Simulationen normal auf die Kesselwand steht. In Abbildung 23 ist das Profil des Ammoniak-Massenanteils gemeinsam mit den Vektoren der Absolutgeschwindigkeit im Vertikalschnitt bei der Koordinate $z=0.5$ m dargestellt.

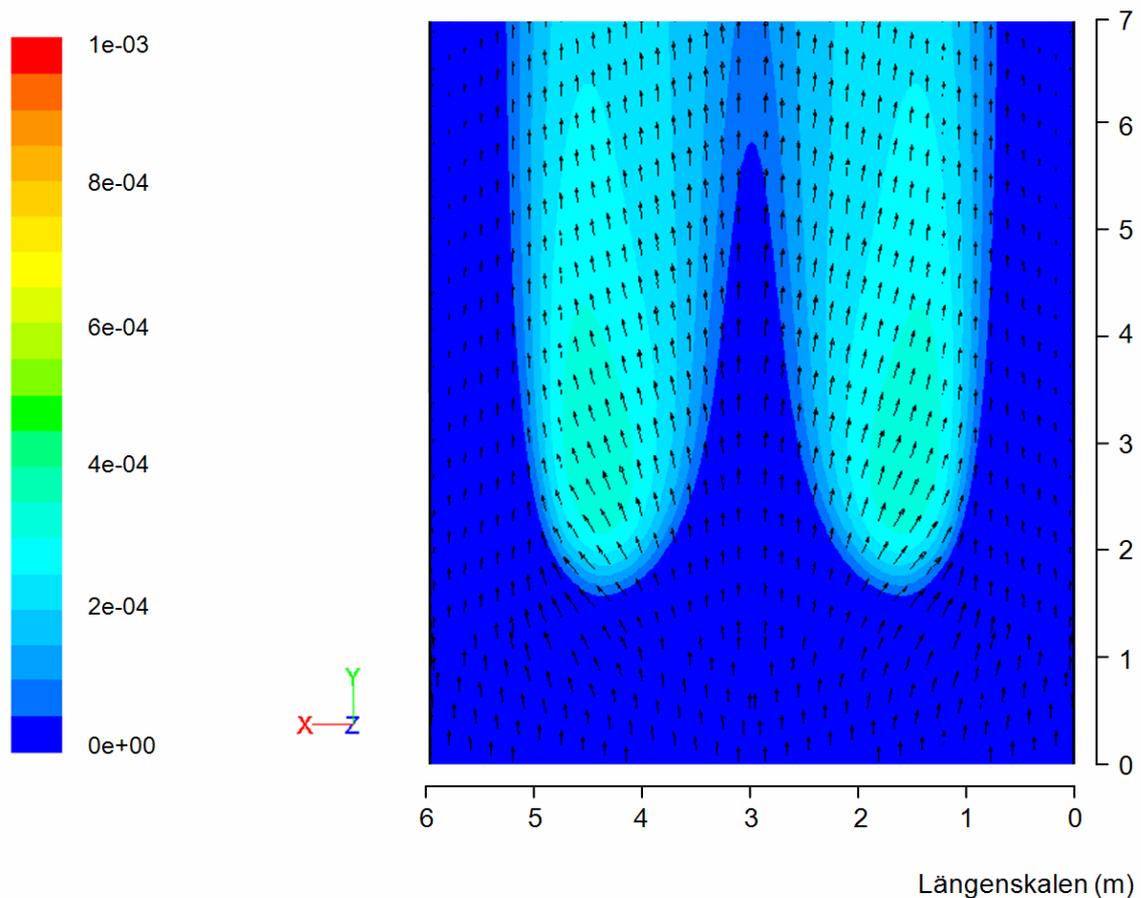


Abbildung 23: Profil des Ammoniak-Massenanteils im Vertikalschnitt bei $z=0.5$ m mit Geschwindigkeitsvektoren.

Zu erkennen sind Strömungsbewegungen, die aufgrund des Eindüsungsvorgangs im Bereich von der Höhe der Eindüsung bis etwa $y=4$ m und von $x=1$ bis 2 m in Richtung Wand zeigen. Der höchste Massenanteil des Ammoniaks von etwa 325 ppm liegt in der Region von $y=2$ bis 4.3 m und $x=1.2$ bis 1.9 m. Am Rauchgasaustritt hat die Ammoniak-Konzentration den Wert 225 ppm im Bereich von $x=1.2$ bis 2.2 m. In Abbildung 24 ist das Profil des Ammoniak-Massenanteils zusammen mit den Geschwindigkeitsvektoren dargestellt.

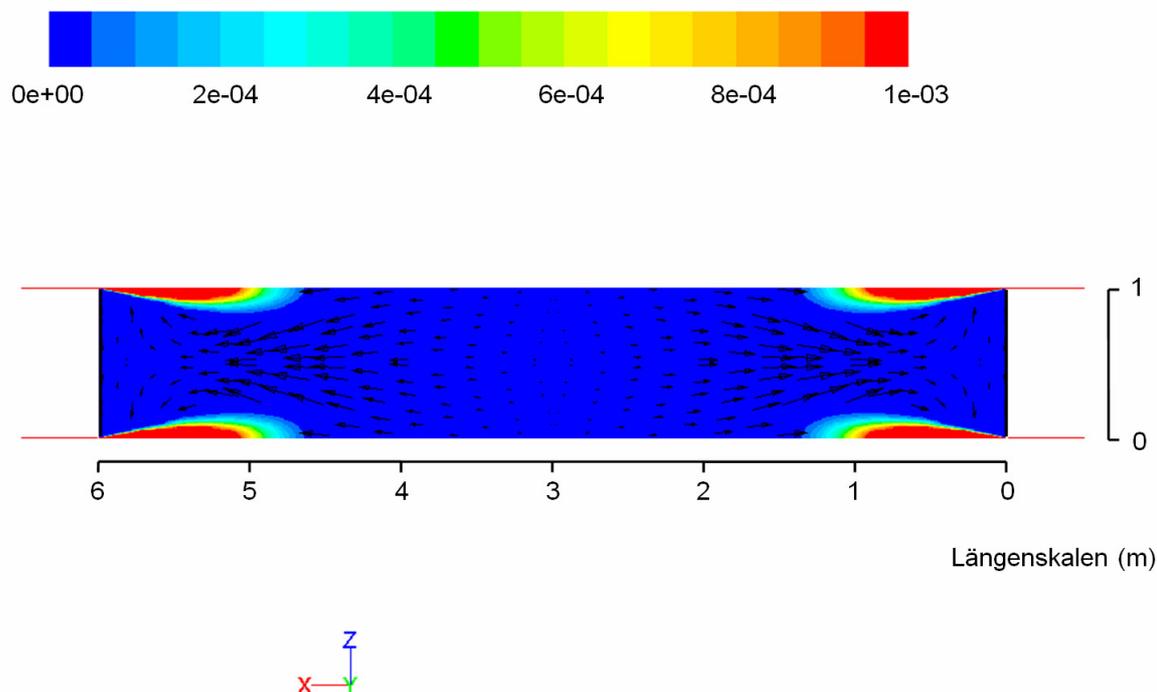


Abbildung 24: Profil des Ammoniak-Massenanteils im Horizontalschnitt in der Eindüsungsebene ($y=1$ m) mit Geschwindigkeitsvektoren.

Um die Strömungsbewegungen nachvollziehen zu können, sind die Vektoren der Absolutgeschwindigkeit abgebildet. Im Bereich der Eindüsungsstelle sind für eine bessere Veranschaulichung die Geschwindigkeitsvektoren nicht abgebildet, da der Absolutbetrag der Geschwindigkeit einiger Teilchen in dieser Region, um Größenordnungen höher liegt. Zu erkennen sind Strömungsbewegungen hin zur Eindüsungsstelle. Dadurch wird Rauchgas angesaugt und die Durchmischung mit dem eingedüsten Reduktionsmittel Ammoniak gefördert. Gebiete mit Ammoniak-Massenanteilen über 1000 ppm liegen in der Eindüsungsebene ($y=1$ m) von Düsenaustritt strahlförmig bis etwa 0.9 m Abstand normal zur Kesselwand vor. Ab einer Distanz von rund 1.4 m normal zur Wandfläche ist faktisch kein Ammoniak mehr mit den Rauchgasen vermischt. Die Ausbreitung des im eingedüsten Wasserdampf-Ammoniak-Gemisch enthaltenen Ammoniaks in z -Richtung beläuft sich auf maximal 0.17 m oder etwa einem Drittel der Tiefe des Kesselsegments. In Abbildung 25 sind neben dem Profil des Ammoniak-Massenanteils die Vektoren der Absolutgeschwindigkeit am Rauchgasaustritt dargestellt.

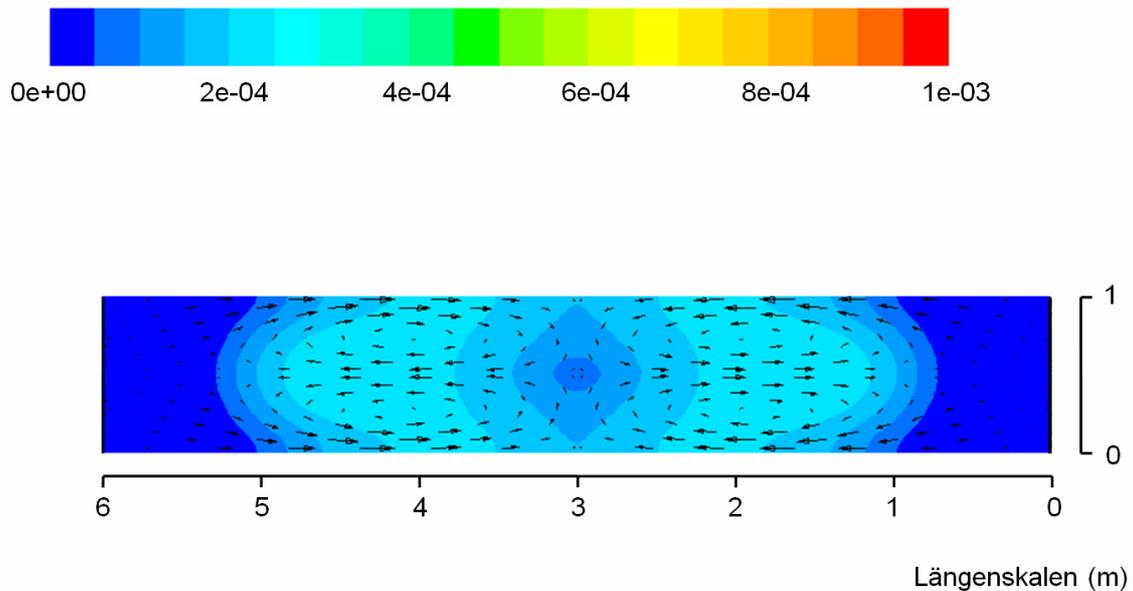


Abbildung 25: Profil des Ammoniak-Massenanteils am Rauchgasaustritt ($y=7$ m) mit Geschwindigkeitsvektoren.

An der Strömungsbewegung der Rauchgase am Rauchgasaustritt ist deutlich eine zirkulierende Bewegung in jedem der vier dargestellten Kesselsegmente ersichtlich. Das Zentrum der zirkulierenden Bewegung, des zum Koordinatenursprung nächstgelegenen Kesselsegments, liegt etwa bei $x=1.8$ m und $z=0.25$ m. Bis zu einem Abstand von zirka 0.7 m von der Kesselwand ist de facto kein Ammoniak in den Rauchgasen enthalten. Der maximale Ammoniak-Massenanteil im Rauchgasaustritt beträgt 225 ppm und ist in etwa in einem Bereich von $x=1.2$ bis 2.5 m verteilt.

5.5.2 Mischungsqualität

Um die Qualität der Mischung des eingedüsten Ammoniakgases mit den Rauchgasen bestimmen zu können, wird die Schwankungsbreite σ des Ammoniak-Massenanteils in mehreren horizontalen Auswertungsebenen über der Eindüsung ermittelt. Die Berechnung der Schwankungsbreite σ des Ammoniak-Massenanteils x erfolgt durch

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{A} \sum_{i=1}^n (x_i - x_0)^2 \cdot |A_i|}, \quad (5.32)$$

wobei x_i und A_i der Ammoniak-Massenanteil und die Fläche der betreffenden Zelle sind. x_0 ist der flächengewichtete Mittelwert des Ammoniak-Massenanteils der jeweiligen Auswertungsebene der sich durch

$$x_0 = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^n x_i \cdot |A_i|, \quad (5.33)$$

berechnet. In Tabelle 10 sind die Werte der Schwankungsbreite σ des Ammoniak-Massenanteils, des flächengewichteten Ammoniak-Massenanteils x_0 und des Verhältnisses σ/x_0 in mehreren Vertikalabständen von der Eindüsungsstelle bei 4 bar Düsenvordruck zusammengestellt. Für die Berechnung der Schwankungsbreite σ nach Gl. (5.32) in den horizontalen Auswertungsebenen werden sogenannte „Custom Field Functions“ im Simulationsprogramm definiert, um eine Gewichtung durch die Zellfläche vorzunehmen. Standardmäßig kann die Standardabweichung einer beliebigen Größe im Postprocessing berechnet werden, jedoch erfolgt dabei keine Gewichtung nach der Zellfläche, wie sie hier definiert ist. Die Gewichtung nach der Zellfläche ist aber von besonderer Bedeutung, da beispielsweise im Wandbereich kleinere Zellen in Erscheinung treten und sich grundsätzlich die Zellenanzahl und -größe in den einzelnen Auswertungsebenen unterscheiden können.

Tabelle 10: Schwankungsbreite σ des NH_3 -Massenanteils, flächengewichteter NH_3 -Massenanteil x_0 und σ/x_0 in horizontalen Ebenen über der Eindüsungsstelle mit 4 bar Düsenvordruck.

y (m)	σ	x_0	σ/x_0
2	1.65e-04	1.24e-04	1.33
3	1.30e-04	1.35e-04	0.96
4	1.09e-04	1.36e-04	0.81
5	9.73e-05	1.35e-04	0.72
6	8.99e-05	1.33e-04	0.68
7	8.50e-05	1.31e-04	0.65

Der Verlauf von σ/x_0 mit zunehmendem Vertikalabstand von der Eindüsungsebene mit 3 und 4 bar Düsenvordruck ist in Abbildung 26 dargestellt.

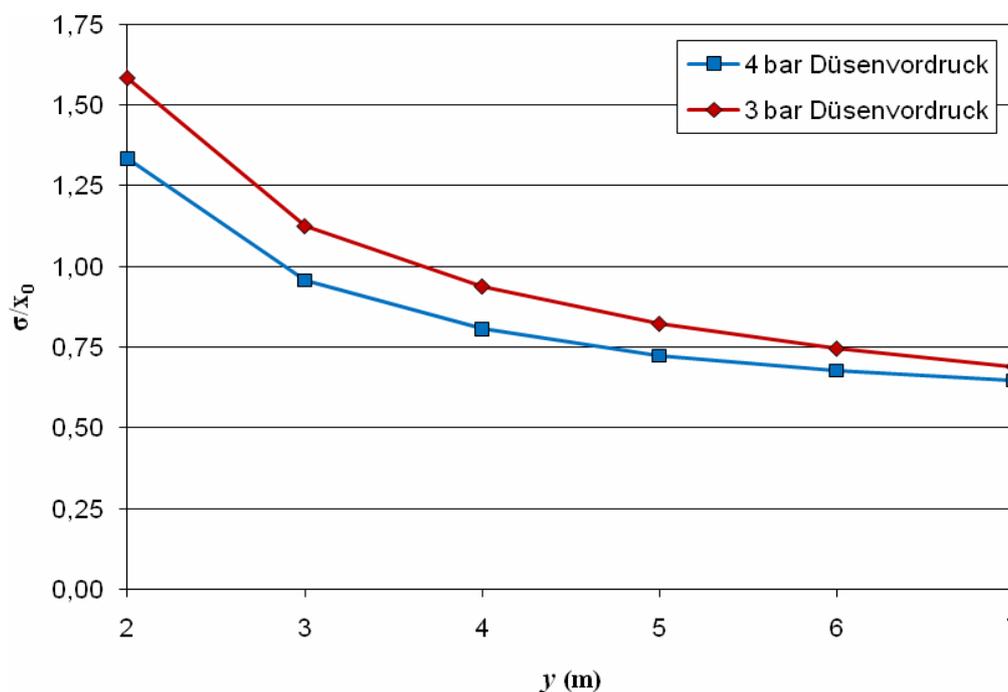


Abbildung 26: Verlauf von σ/x_0 mit zunehmendem Vertikalabstand von der Eindüsungsebene bei 3 und 4 bar Düsenvordruck.

Die Schwankungsbreite des Ammoniak-Massenanteils σ bezogen auf den flächengewichteten Mittelwert des Ammoniak-Massenanteils x_0 nimmt mit zunehmendem Vertikalabstand von der Eindüsungsebene für beide Düsenvordrücke

stetig ab. Je geringer der Wert σ/x_0 , desto gleichmäßiger ist das Ammoniakgas in der betreffenden Auswertungsebene verteilt. Für 4 bar Düsenvordruck liegen die Werte von σ/x_0 im gesamten Bereich von $y=2$ bis 7 m unter jenen mit $p_0=3$ bar. Aufgrund des höheren Düsenvordrucks stellt sich ein höherer Gesamt-massenstrom durch die Düse ein. Durch den höheren eingebrachten Impuls können die eingedüsten Spezies besser in die Rauchgasströmung eindringen und mit dieser vermischt werden. In der Ebene $y=2$ m betragen die Werte von σ/x_0 1.58 und 1.33 für $p_0=3$ und 4 bar. Die relativen Abweichungen der Werte von σ/x_0 zwischen 3 und 4 bar Düsenvordruck nehmen von $y=2$ bis 7 m von 16 auf 6% stetig ab. Die gleichmäßigere Verteilung der reduzierenden Spezies Ammoniak durch den höheren Düsenvordruck ist umso stärker ausgeprägt, je geringer der Vertikalabstand hin zur Eindüsungsstelle ist. Die charakteristische Größe σ/x_0 nimmt innerhalb des Auswertungsintervalls (von einem Meter bis sechs Meter über der Eindüsungsebene) rund 56% ($p_0=3$ bar) bzw. 51% ($p_0=4$ bar) ab.

Die Vermischung des Eindüsungstrahls mit der Rauchgasströmung wird stark durch die Strömungsgeschwindigkeit der Rauchgase, der Geschwindigkeit des eingedüsten Fluids und der Eindüsungsrichtung beeinflusst [24]. Die Durchdringung des quer zur Rauchgasströmung eingedüsten Strahls hängt vom Impulsverhältnis J ab und berechnet sich nach Ostberg et al. [36]

$$J = \frac{\rho_j U_j^2}{\rho_0 U_0^2}. \quad (5.34)$$

ρ_j und ρ_0 sind die Dichten des eingedüsten Fluids im Düsenaustritt und in der Querströmung (Rauchgasströmung). U_j und U_0 sind die Geschwindigkeiten des eingedüsten Fluids im Düsenaustritt und in der Querströmung. Das Impulsverhältnis J liegt für den Fall $p_0=3$ bar 25% unter jenem mit $p_0=4$ bar, für den $J=93761$ berechnet wurde. Die Vermischung des eingedüsten Fluids setzt sich aus der Verteilung des eingedüsten Fluids im Reaktor durch die Turbulenz der Querströmung und der Vermischung auf molekularer Ebene, verursacht durch die sogenannte „small-scale“ Turbulenz und molekularer Diffusion [36] zusammen.

Das Aufplatzen des eingedüsten Strahls wird hauptsächlich durch die „large-scale“ Turbulenz der Querströmung hervorgerufen [36].

5.5.3 Mittengeschwindigkeit des Strahls

In diesem Abschnitt wird der Verlauf der Mittengeschwindigkeit des Freistrahls im Abstand von der Kesselwand dargestellt. Als Randbedingung wird der Düsenvordruck mit 4 bar festgesetzt. Dabei werden die Mittengeschwindigkeiten des Strahles der CFD-Simulation und der empirischen Berechnung gegenüber gestellt. Da der Gasstrahl nach Austritt aus der Düse durch den Rauchgasstrom abgelenkt wird, weicht die Strahlachse mit zunehmender Entfernung von der Kesselwand immer mehr von der verlängerten Düsenachse ab. Der Verlauf der Mittengeschwindigkeit längs der Strahlachse berechnet sich für kreisrunde Hochdruck-Freistrahlen aus konvergenten Längsdüsen mit den folgenden empirischen Beziehungen nach Rist [38] Gl. (5.35) und (5.36). Die fiktive Kernlänge des Strahls x_{0f} berechnet sich anhand des empirischen Zusammenhangs

$$\frac{x_{0f}}{d} = 10.6 \cdot \left(\frac{p_{k,tot}}{p_1} \right)^{0.42}, \quad (5.35)$$

wobei d der Düsenaustrittsdurchmesser, p_1 der Gegendruck und $p_{k,tot}$ der Totdruck am Düsenaustritt sind. Aufgrund dessen, dass während der Durchströmung der Düse keine Stöße auftreten gilt: $p_{k,tot} = p_{0,tot}$. Mit den gegebenen Größen ergibt sich für die fiktive Kernlänge des Strahls $x_{0f} = 76$ mm. Der Geschwindigkeitsabfall im Unterschallbereich – ab der fiktiven Kernlänge des Strahls stromabwärts – berechnet sich mit

$$w_m = w_k \cdot \left(\frac{x/d}{x_{0f}/d} \right)^{-1.125}. \quad (5.36)$$

Der Exponent ist kleiner als -1, daher sinkt die Mittengeschwindigkeit w_m stärker als reziprok zum Abstand x vom Düsenaustritt. In Abbildung 27 sind die Verläufe

der der Mittengeschwindigkeit des Gasstrahls durch empirische Berechnung und mittels CFD-Simulation vom Düsenaustritt bis zu einem Normalabstand von 1.5 m von der Kesselwand aufgetragen.

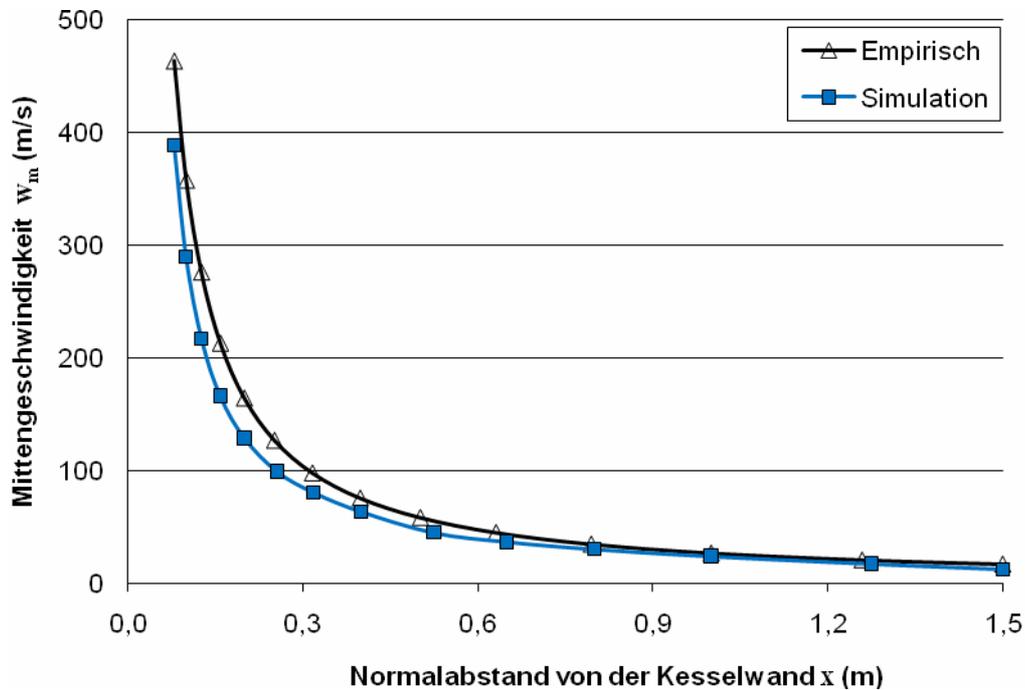


Abbildung 27: Verläufe der Mittengeschwindigkeiten des Gasstrahls durch empirische Berechnung und mittels CFD-Simulation.

Der Wert der Mittengeschwindigkeiten der CFD-Simulation liegt im Abstand der fiktiven Kernlänge $x_{0f} = 76.0$ mm von der Kesselwand rund 72.3 m/s oder 14.8% unter dem Wert der empirisch berechneten Mittengeschwindigkeit, die an dieser Stelle der Austrittsgeschwindigkeit von 487.6 m/s (Handrechnung) entspricht. Der Differenzbetrag der Mittengeschwindigkeiten der empirischen Berechnung und der Simulation nimmt bis zu einem Abstand von 1 m von der Kesselwand stetig ab und beträgt an dieser Stelle 2.7 m/s oder 9.8%. Im Normalabstand von 1 m zur Kesselwand ergibt die CFD-Simulation eine Mittengeschwindigkeit des Gasstrahls von 24.2 m/s. Mit zunehmendem Abstand von der Kesselwand erhöht sich der Differenzbetrag der Mittengeschwindigkeiten wieder leicht und beträgt im Abstand von 1.5 m von der Kesselwand 4.3 m/s.

5.5.4 Überschallgebiet

Beim Eindüsungsvorgang kommt es zur Ausbildung eines lokalen Überschallgebiets im Bereich der Düsenmündung, da der Dampf-Ammoniak-Strahl beim Eintritt in den Kessel weiter expandiert. Den Ergebnissen in diesem Abschnitt liegt die Randbedingung 4 bar Düsenvordruck zugrunde. Die Abbildungen werden in der Ebene $z=0$ dargestellt.

5.5.4.1 Mach-Zahl

In Abbildung 28 ist das Profil der Mach-Zahl im Bereich der Düsenmündung abgebildet, das beginnend vom Düsenaustritt bis 80 mm in den Kessel hinein dargestellt ist.

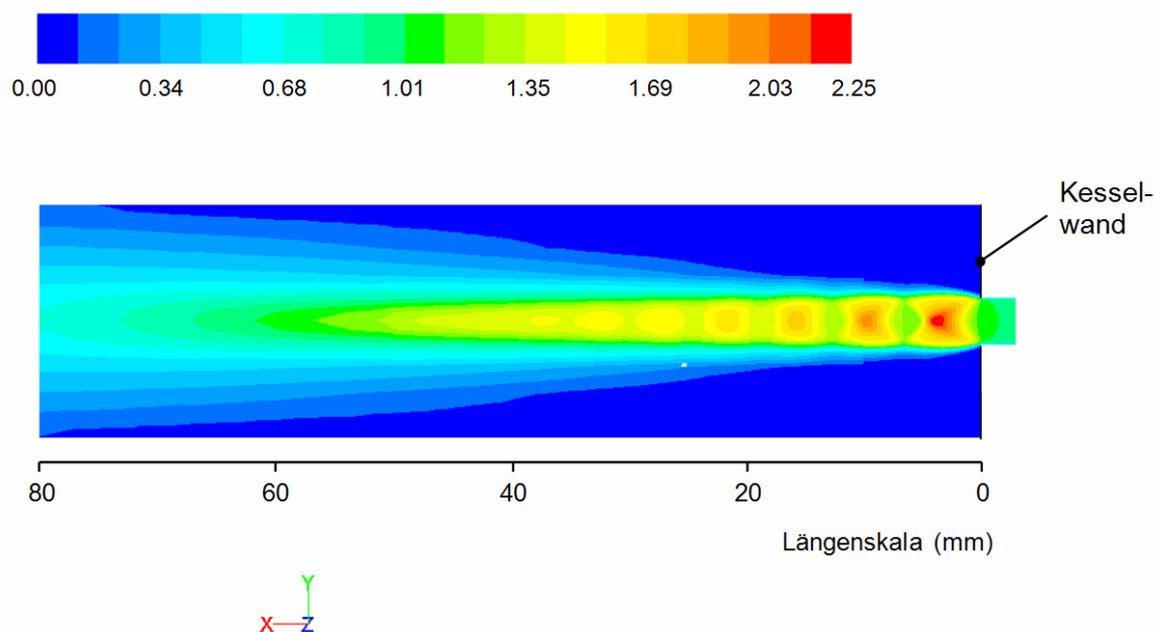


Abbildung 28: Profil der Mach-Zahl des Dampf-Ammoniak-Strahls bei Eintritt in den Kessel im Bereich der Düsenmündung.

Der Bereich mit Mach-Zahlen $M > 1$, reicht bis ca. 60 mm in den Kessel hinein. Der Wasserdampf-Ammoniak-Strahl erreicht in der konvergenten Düse im Mündungsquerschnitt das Geschwindigkeitsverhältnis $M = 1$ und beschleunigt nach Austritt aus der Düse weiter bis zu einem Maximalwert von $M = 2.25$. Der im Abschnitt 5.2.2 vereinfacht berechnete Wert des Geschwindigkeitsverhältnisses im Freistrahls beträgt $M_1 = 1.55$. Wie man Abbildung 28 entnehmen kann, weitet sich der Strahl nach Austritt aus der Düse weiter auf. Es handelt sich in diesem Fall um

einen unterexpandierten Strahl, da der kritische Druck p_k in der Düsenmündung höher ist als der Gegendruck p_1 .

Die Berechnung geometrischer Maße der ersten Strahlzelle des rotationssymmetrischen Freistrahls erfolgt aus halbempirischen Näherungsgleichungen aus Versuchsreihen von Love et al. [24] zitiert von Rist [38]. Für die Länge der ersten Strahlzelle L_Z bei kritischer Abströmung von konvergenten Düsen ergibt sich näherungsweise [38]

$$\frac{L_Z}{d} \approx 1.43 \cdot \left(\frac{p_{k,tot}}{p_1} \right)^{0.4} - 1. \quad (5.37)$$

d und $p_{k,tot}$ sind der Durchmesser und der Totaldruck im Düsenaustrittsquerschnitt. p_1 ist der Gegendruck (Kesseldruck). Für den vorliegenden Fall ergibt sich für die Länge der ersten Strahlzelle $L_Z = 6.0$ mm. Der Abstand vom Austrittsquerschnitt der Düse zum Geradstoß (Machsche Scheibe) bzw. zum Stoßfrontschnittpunkt berechnet sich näherungsweise für kritische Abströmung in Abhängigkeit vom statischen Druckverhältnis nach Adamson und Nicholls [2] zitiert von Rist [38]

$$\frac{L_S}{d} = 0.92 \cdot \left(\frac{p_k}{p_1} \right)^{0.52} \quad (5.38)$$

p_k ist der kritische Druck im Austrittsquerschnitt. Der relative Abstand des Geradstoßes $L_S = 4.2$ mm. In Abbildung 29 sind die Abstände L_S und L_Z der erste Strahlzelle im Profil der Mach-Zahl der CFD-Simulation eingetragen.

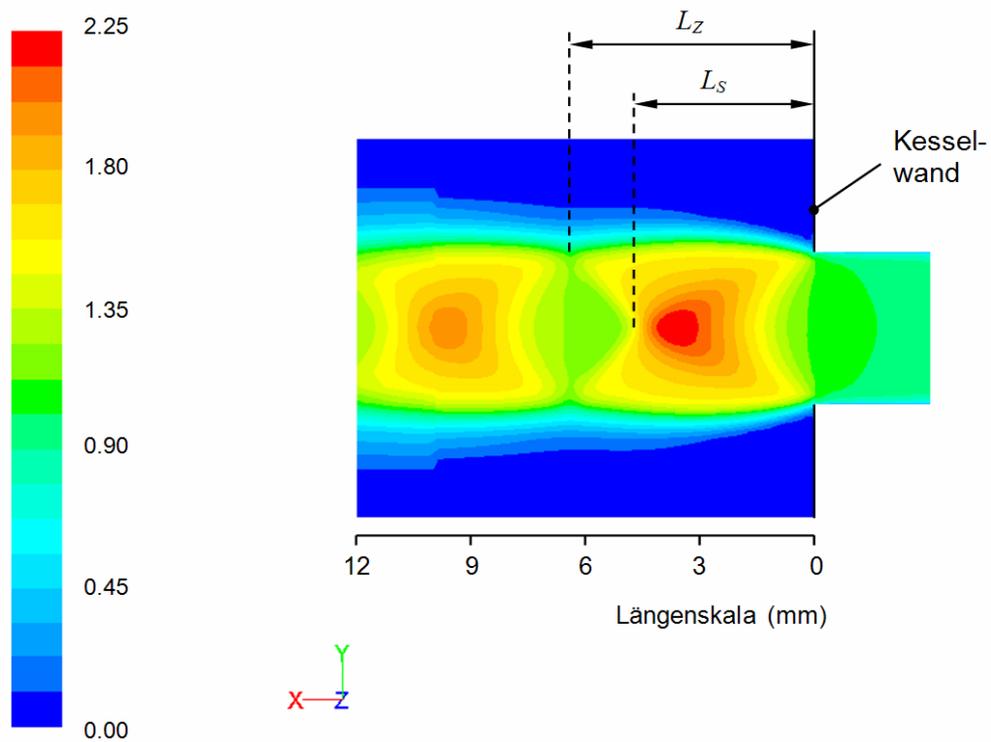


Abbildung 29: Länge der ersten Strahlzelle L_Z und Abstand des Stoßfrontschnittpunkts L_S vom Düsenaustritt, eingetragen im Profil der Mach-Zahl.

Die im Profil der Mach-Zahl bemaßten Größen, $L_Z \approx 6.4$ mm und $L_S \approx 4.7$ mm sind tendenziell höher, als die durch empirische Beziehungen berechneten Werte nach Gl. (5.37) und (5.38), die für $L_Z = 6.0$ mm und für $L_S = 4.2$ mm ergeben.

5.5.4.2 Geschwindigkeit

In Abbildung 30 ist die Verteilung des Absolutbetrages der Strömungsgeschwindigkeit im düsennahen Bereich dargestellt.

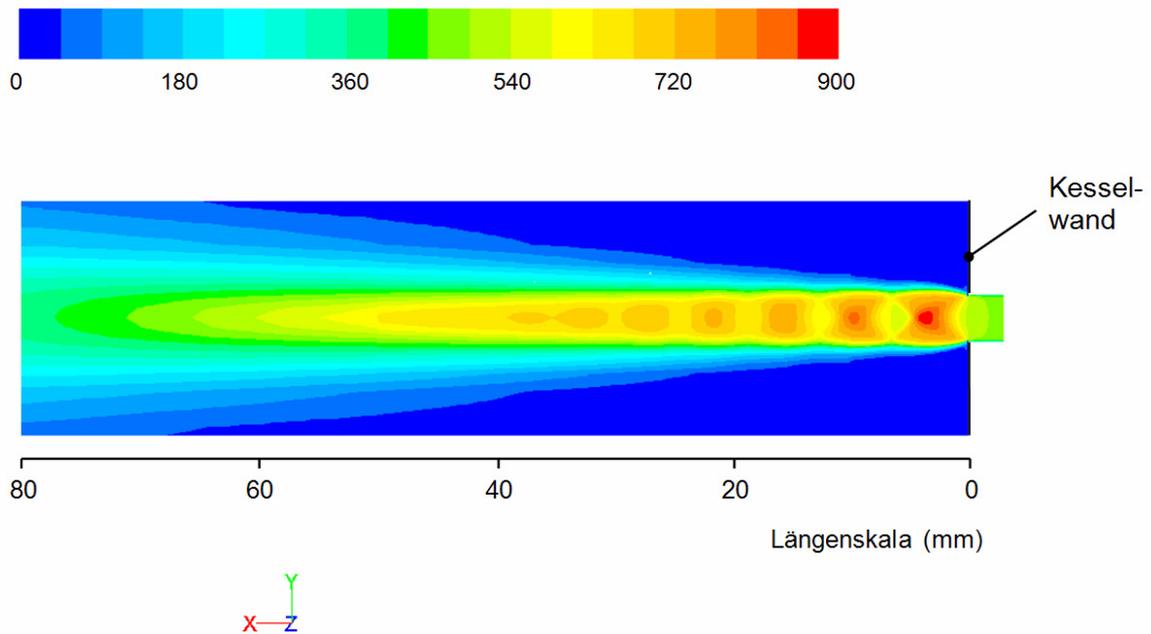


Abbildung 30: Profil des Absolutbetrages der Geschwindigkeit (m/s) des Dampf-Ammoniak-Strahls bei Eintritt in den Kessel im Bereich der Düsenmündung.

Die Geschwindigkeit des Dampf-Ammoniak-Strahls erreicht lokale Maxima von bis zu 889 m/s. Der Wert aus der Handrechnung für die Geschwindigkeit im Freistrahls beträgt 691 m/s (siehe Abschnitt 5.2.2). Der Wert der Handrechnung liegt rund 22% unter dem der CFD-Simulation. In der Realität treten komplexe Kompressions- und Expansionsgebiete auf, die sich einander überlagern. Dadurch bilden sich Stellen aus, an denen auf tieferen Druck als auf den vorherrschenden Gegendruck p_1 expandiert wird. Es ist deshalb als physikalisch richtig anzusehen, dass die Geschwindigkeit lokal höhere Werte erreicht, als die vereinfachte Handrechnung dies darlegt. Auch hier sind Machsche Gebiete mit „diamond shocks“ im Strahl zu erkennen.

5.5.4.3 Statischer Druck

In Abbildung 31 ist der Verlauf des statischen Drucks vom Düsenaustritt bis 40 mm in den Kessel hinein dargestellt. Der statische Druck ist relativ zu dem in der Simulation festgesetzten Betriebsdruck von 101325 Pa dargestellt. Um den

absoluten statischen Druck zu erhalten, ist der Betriebsdruck dem abgebildeten Druckprofil zu addieren.

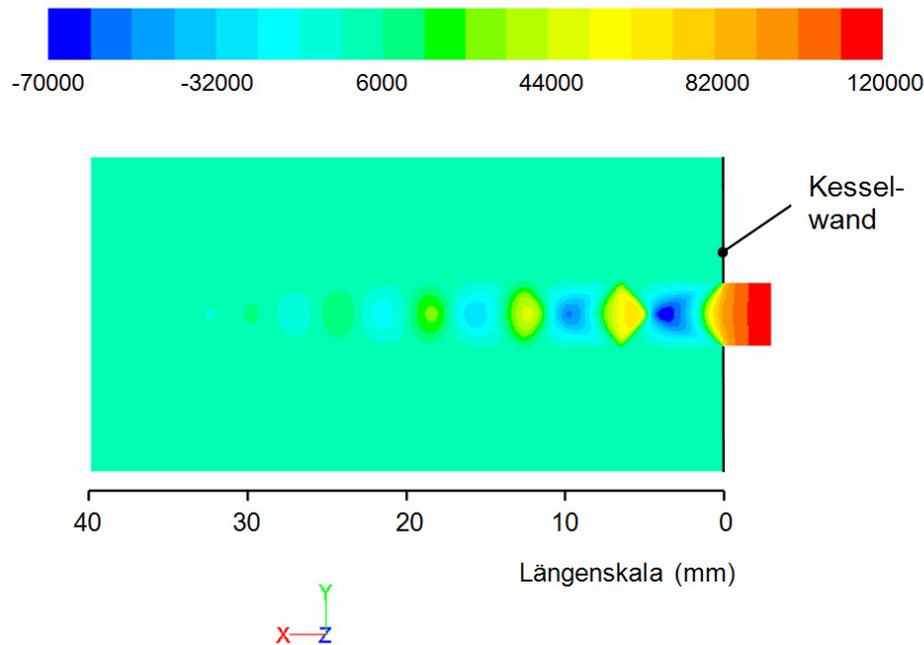


Abbildung 31: Profil des statischen Drucks⁵ (Pa) des Dampf-Ammoniak-Strahls bei Eindüsung in den Kessel im Bereich der Düsenmündung.

Der Verlauf des statischen Drucks zeigt ab dem Mündungsquerschnitt abwechselnd Felder mit höherem und geringerem statischen Druck. Deutlich zu erkennen ist dabei die in Strahlrichtung abnehmende Intensität der sich ausbildenden Strahlzellen. Von der Düsenmündung ausgehende Expansionswellen werden am Rand des Freistrahls als Kompressionswellen reflektiert. Dadurch treten Expansions- und Kompressionsgebiete auf, die sich gegenseitig überlagern [28] und [48]. Der Strahlquerschnitt nimmt in Strömungsrichtung zunächst periodisch etwas zu und dann wieder ab, bis diese Vorgänge durch viskose Wechselwirkung mit der Umgebung verschwinden und ein einfacher Unterschall-Strahl hoher Geschwindigkeit übrig bleibt [38]. Dieses Verhalten wurde in Kapitel 3 bereits detaillierter behandelt.

⁵ Statischer Druck ist relativ zum Betriebsdruck (101325 Pa) angegeben.

6 Untersuchung der Reaktionsmechanismen

6.1 Einleitung

Ein Aufgabepunkt der Diplomarbeit besteht darin, geeignete Reaktionsmechanismen zur Beschreibung des SNCR-Verfahrens zu finden. In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der CFD-Simulationen der untersuchten Reaktionsmechanismen dargelegt. Bei der Auswahl der Reaktionsmechanismen soll auf die Einsetzbarkeit für industrielle Anwendungen Rücksicht genommen werden, da chemische Mechanismen häufig durch eine Vielzahl von Reaktionsgleichungen beschrieben werden, die in realen Kesselberechnungen aufgrund des hohen zusätzlichen Berechnungsaufwands nicht gelöst werden können. Daher ist das Ziel, das reale Verhalten des SNCR-Verfahrens abhängig von den wesentlichen Einflussfaktoren, die in Kapitel 1 bereits diskutiert wurden, durch anwendungsorientierte Reaktionsmechanismen abzubilden. Zu diesem Zweck werden ein zweistufiger, ein siebenstufiger, und ein detaillierter 31-stufiger Reaktionsmechanismus untersucht. Die Validierung der Berechnungsergebnisse der Stickstoffmonoxid-Reduktion und des Ammoniak-Schlupfs erfolgt durch experimentelle Messwerte von Duo et al. [15], Lee et al. [24] und Nguyen et al. [33].

6.2 Numerische Berechnung chemischer Reaktionen

Detaillierte Berechnungen chemischer Reaktionen erfordern die Modellierung der turbulenten Strömung und der Reaktionskinetik, die in Wechselwirkung zu einander stehen. Zur Beschreibung der detaillierten Kinetik des SNCR-Verfahrens ist eine große Anzahl (hunderte) von Elementarreaktionen erforderlich [34]. Die Verwendung derart aufwendiger Reaktionsmechanismen in Verbindung mit CFD-Simulationen ist für industrielle Anwendungen kaum denkbar. In diesem Zusammenhang ist der ISAT-Algorithmus (in-situ adaptive tabulation) von Pope (1997) von besonderer Wichtigkeit, da diese Methodik es ermöglicht, die Berechnungszeit von chemischen Reaktionen um den Faktor Hundert zu reduzieren.

Der ISAT-Algorithmus findet in industriellen Problemstellungen besonders häufig in Verbindung mit dem Eddy-Dissipation Concept (EDC) Anwendung. Das Eddy-Dissipation Concept gehört zu der Gruppe der Wirbelzerfallsmodelle. Es be-

schreibt die Interaktion von Reaktionskinetik und Turbulenz in relativ einfacher mathematischer Formulierung. Dieses Modell ist aufgrund seiner Anwendbarkeit für dreidimensionale, komplexe Feuerraumgeometrien mit unterschiedlichsten Verbrennungsbedingungen am besten für die Verbrennungssimulation geeignet [34]. Das EDC-Modell wurde in den vorliegenden Simulationen zur Berechnung der chemischen Reaktionen und deren Wechselwirkung mit der turbulenten Strömung verwendet.

Im Folgenden wird auf die mathematische Formulierung des EDC-Modells nach Fluent [3] eingegangen. Grundsätzlich ist das EDC-Modell eine Weiterentwicklung des Eddy-Dissipation Modells (EDM) von Magnussen und Hjertager (1976). Das EDC-Modell von Magnussen (1981) geht von der Annahme aus, dass der Großteil der chemischen Reaktionen auf den kleinsten Längenskalen (small turbulent structures) der turbulenten Energiekaskade abläuft. Der Längenteil der feinen Strukturen ξ^* am Fluid berechnet sich durch

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4}, \quad (6.1)$$

mit der Konstanten $C_\xi = 2.1377$ für den Volumenanteil, der kinematischen Viskosität ν , der turbulenten Dissipationsrate ε , und der turbulenten kinetischen Energie k . Daraus ermittelt sich der Volumenanteil ξ^{*3} der feinen Skalen, indem ξ^* zur dritten Potenz genommen wird. Weiter wird angenommen, dass die chemischen Reaktionen der Spezies in den feinen Strukturen auf einer Zeitskala τ^* stattfinden, die wie folgt definiert ist

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}. \quad (6.2)$$

Hier ist C_τ die Konstante der Zeitskala mit dem Wert 0.4082. Das im verwendeten Simulationsprogramm Fluent implementierte EDC-Modell geht von der Annahme aus, dass die Reaktionen auf den feinen Skalen, wie in einem Reaktor mit konstantem Druck ablaufen. Die Reaktionen laufen über der Zeitskala τ^* ab, basie-

rend auf den Arrhenius-Raten nach Gl. (6.3), und werden numerisch integriert durch den ISAT-Algorithmus. Für reversible Reaktionen berechnet sich die molare Produktions- bzw. Zersetzungsrates der Spezies i der Reaktion r durch [3]

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma(v''_{i,r} - v'_{i,r}) \left(k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta'_{j,r}} - k_{b,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{v''_{j,r}} \right). \quad (6.3)$$

Γ berücksichtigt die Effekte der sogenannten „third bodies“ auf die Reaktionsrate. $v'_{i,r}$ und $v''_{i,r}$ sind die stöchiometrischen Koeffizienten des Reaktants i und des Produkts i der Reaktion r . $C_{j,r}$ und $\eta'_{j,r}$ sind die molare Konzentration der Spezies j und der Geschwindigkeitsexponent des Reaktants der Spezies j . Die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante $k_{f,r}$ der Vorwärtsreaktion berechnet sich nach dem bekannten Arrhenius-Ansatz

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT}, \quad (6.4)$$

und die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante $k_{b,r}$ für die Rückreaktion berechnet sich durch

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_r}. \quad (6.5)$$

A_r ist der präexponentielle Faktor, β_r ist der Temperaturexponent und E_r ist die erforderliche Aktivierungsenergie für den Reaktionsstart der Reaktion r . R und T sind die universelle Gaskonstante und die Temperatur. Weiter gilt für K_r der Zusammenhang

$$K_r = \exp \left(\frac{\Delta S_r^0}{R} - \frac{\Delta H_r^0}{RT} \right) \left(\frac{p_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{i=1}^N (v''_{i,r} - v'_{i,r})}, \quad (6.6)$$

wobei p_{atm} der Atmosphärendruck (101325 Pa) ist. $\nu'_{i,r}$ und $\nu''_{i,r}$ sind die stöchiometrischen Koeffizienten der Edukte und der Produkte der chemischen Reaktion r . Die Terme im Exponentialausdruck von Gl. (6.6) beschreiben die Änderung der freien Gibbsschen Energie. Der Produktions- bzw. Zersetzungsterm entspricht dem Quellterm in der Erhaltungsgleichung der Spezies j und berechnet sich durch [3]

$$R_j = \frac{\rho(\xi^*)^2}{\tau^*(1-\xi^{*3})} (Y_j^* - Y_j) \quad (6.7)$$

Dabei ist Y_j^* der Massenanteil der Spezies j in der feinen Struktur nach Ablauf der Reaktion über die Zeitdauer τ^* .

6.3 Reaktionsmechanismen

In diesem Abschnitt werden die Parameter und die Schemata der untersuchten Reaktionsmechanismen vorgestellt.

6.3.1 Der zweistufige Reaktionsmechanismus

Der zweistufige Reaktionsmechanismus nach Duo et al. [15] ist ein empirisches Modell für die selektive nicht-katalytische Reduktion von Stickstoffmonoxid mit dem Reduktionsmittel Ammoniak. Das Modell basiert auf zwei empirischen Reaktionen. Eine beschreibt die Reduktion von Stickstoffmonoxid durch Ammoniak zu Stickstoff, und die andere die Oxidation von Ammoniak zu Stickstoffmonoxid. Dieses Modell ist nachweislich im Stande, die wesentlichen Einflussfaktoren des SNCR-Verfahrens – Temperatur an der Eindüsungsstelle, Temperaturgradient, Verweilzeit und Verhältnis der Menge des eingedüsten Ammoniaks zu Stickoxidfracht – zu beschreiben [12]. In Abbildung 32 ist der Reaktionsmechanismus durch zwei Reaktionspfade beschrieben.

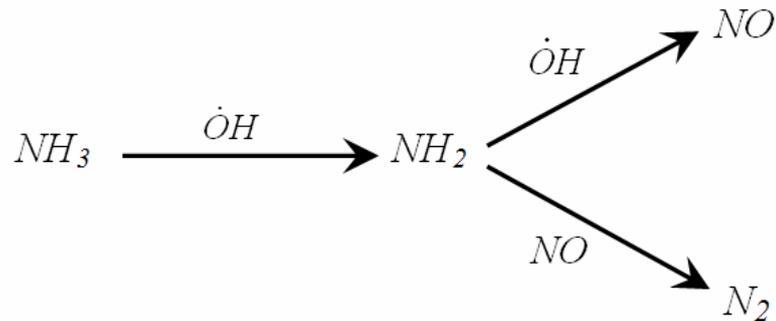


Abbildung 32: Schema des zweistufigen Reaktionsmechanismus nach Duo et al. [15].

Ein Reaktionspfad führt zur NO -Reduktion und ein weiterer zur NO -Produktion. Die Reaktionsgleichungen lauten für die NO -Reduktion



und für die Oxidation von NH_3 zu NO



Die Reaktionsordnungen für NO und NH_3 und die empirischen Geschwindigkeitskonstanten k_r und k_{ox} wurden bei einem Sauerstoffgehalt von 4% näherungsweise bestimmt [12]. Die Reaktionsordnungen für NO Gl. (6.8) und für NH_3 Gl. (6.8) und (6.9) haben den Wert Eins. Daraus ergeben sich die Reaktionsgeschwindigkeiten R_{NO} und R_{NH_3} für NO und NH_3 [12]

$$R_{\text{NO}} = -k_r[\text{NO}][\text{NH}_3] + k_{ox}[\text{NH}_3], \quad (6.10)$$

und

$$R_{\text{NH}_3} = -k_r[\text{NO}][\text{NH}_3] - k_{ox}[\text{NH}_3]. \quad (6.11)$$

Die Parameter des zweistufigen Reaktionsmechanismus für die Formulierung der Geschwindigkeitskonstanten mit dem Arrhenius-Ansatz Gl. (6.4) sind in Tabelle 11 zusammengestellt.

Tabelle 11: Parameter des zweistufigen Reaktionsmechanismus.

Reaktion	$A \left[\frac{1}{sK^\beta}, \frac{m^3}{sK^\beta kmol} \right]$	$\beta (-)$	$E \left[\frac{J}{kmol} \right]$
1 $NO + NH_3 + \frac{1}{4} O_2 \rightarrow N_2 + 1\frac{1}{2} H_2O$	2.45e+17	0	2.44e+08
2 $NH_3 + \frac{1}{4} O_2 \rightarrow NO + 1\frac{1}{2} H_2O$	2.21e+14	0	3.17e+08

Die Einheiten des präexponentiellen Faktors A für die Berechnung der Geschwindigkeitskonstanten Gl. (6.4) variieren, abhängig von den Reaktionsordnungen und der Anzahl der Spezies, die mit der betreffenden Geschwindigkeitskonstante multipliziert werden. Die geforderte Einheit der Reaktionsgeschwindigkeiten

muss dabei stets $\frac{kmol}{sm^3}$ sein. Die Einheit des präexponentiellen Faktors A der

Reaktion 1 in Tabelle 11 ist $\frac{m^3}{skmol}$, da die Geschwindigkeitskonstante k_r der Reduktionsgleichung mit zwei Spezies multipliziert wird und die Reaktionsordnungen

für NO und NH_3 Eins sind. Die Einheiten der Spezies sind dabei stets $\frac{kmol}{m^3}$. Im

Gegensatz dazu ist die Einheit von A der Reaktion 2 in Tabelle 11 $\frac{1}{s}$, da die Ge-

schwindigkeitskonstante k_{ox} nur mit der Spezies NH_3 mit der Reaktionsordnung Eins multipliziert wird.

6.3.2 Der 31-stufige Reaktionsmechanismus

Der 31-stufige Reaktionsmechanismus nach Dean et al. [13] beschreibt eine detaillierte Kinetik der NH_3 -Oxidation und wurde in einem Temperaturbereich von 1279 bis 1323K experimentell und theoretisch untersucht. Wichtige Erkenntnisse aus den Untersuchungen sind [13]:

- Die NH_3 -Oxidation nimmt mit zunehmendem Sauerstoffgehalt zu, wird durch vorhandenes Wasser H_2O gehemmt, und wiederum gefördert durch Anteile von Wasserstoff H_2 und Stickstoffmonoxid NO .
- Während der NH_3 -Oxidation verringert sich der NO -Anteil anfangs rapide und anschließend nur langsam.
- Die NH_3 -Oxidation wird durch zwei Gruppen von Reaktionen, die gleichzeitig stattfinden, beschrieben. Eine Reaktionsgruppe oxidiert NH_3 und bildet NO , und die andere reduziert NO zu N_2 .
- NO bildet sich zu Beginn der Reaktion rasch, und anschließend beträchtlich langsamer.
- Die NO -Bildungsrate nach dem anfänglichen starken Anstieg ist bei trockenem NH_3 wesentlich größer als bei feuchtem NH_3 .

In Abbildung 33 ist ein Überblick über die prinzipiellen Reaktionspfade des 31-stufigen Mechanismus [13] dargestellt.

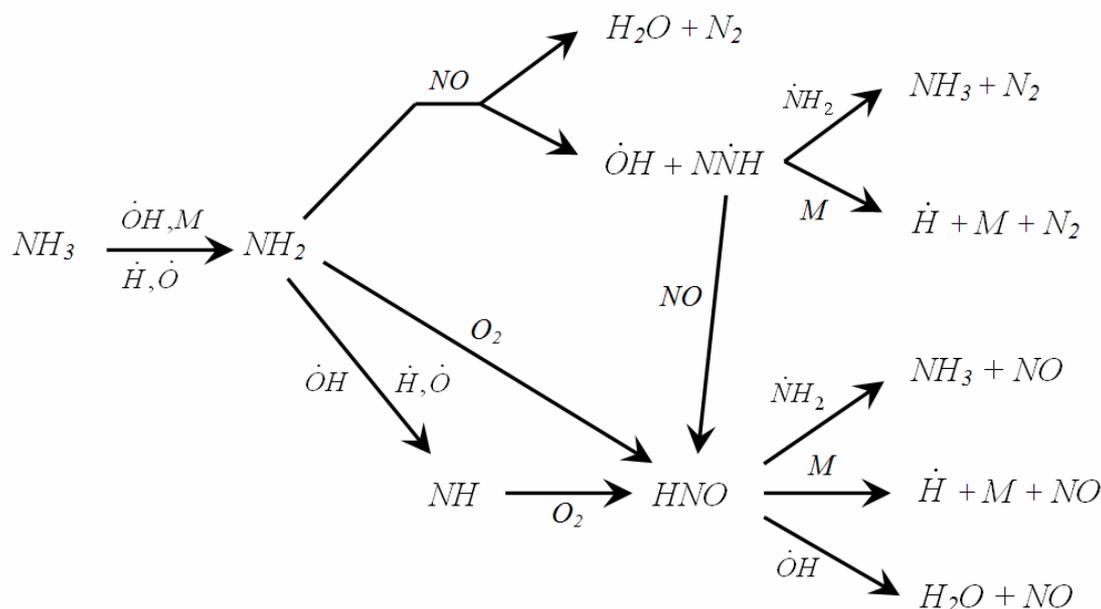


Abbildung 33: Schema des 31-stufigen Reaktionsmechanismus nach Dean et al. [13].

Um den 31-stufigen Reaktionsmechanismus nach Dean et al. [13] mit dem Simulationsprogramm Fluent berechnen zu können, müssen die angegebenen Werte mit den Einheiten mol , cm^3 und s in $kmol$, m^3 und s umgerechnet werden.

Das Eingabefeld des Berechnungsprogrammes erfordert die Eingabe der Aktivierungsenergie E in der Einheit $\frac{J}{kmol}$. In der Literatur sind für den Mechanismus

Werte für das Verhältnis $E/R \cdot 10^{-3}$ angegeben, mit $R = 8.3145 \frac{J}{molK}$ der univer-

sellen Gaskonstante, die entsprechend umgerechnet werden müssen. Weiter sind

die Werte des präexponentiellen Faktors A mit den Einheiten $\frac{1}{sK^\beta}$ bzw.

$\frac{m^3}{sK^\beta kmol}$ in das Eingabefeld des Simulationsprogrammes Fluent einzugeben.

Für den präexponentiellen Faktor A sind in der Literatur Werte für $\log(A)$ angegeben, die ebenfalls umgerechnet werden müssen. Die berechneten Parameter zur Formulierung der Geschwindigkeitskonstanten mit dem Arrhenius-Ansatz Gl. (6.4) und die Reaktionsgleichungen des 31-stufigen Reaktionsmechanismus, die in das Eingabefeld für volumetrische Reaktionen in das Simulationsprogramm eingegeben werden, sind in Tabelle 12 aufgelistet. Die in den Reaktionsgleichungen auftretende Größe M entspricht einer inerten Komponente.

Tabelle 12: Parameter des 31-stufigen Reaktionsmechanismus.

Reaktion	$A \left[\frac{1}{sK^\beta}, \frac{m^3}{sK^\beta kmol} \right]$	$\beta (-)$	$E \left[\frac{J}{kmol} \right]$
1 NH3 + M → NH2 + H + M	4.79e+13	0	3.93e+08
2 NH3 + H → NH2 + H2	2.51e+10	0	7.15e+07
3 NH3 + O → NH2 + OH	1.51e+09	0	2.49e+07
4 NH3 + OH → NH2 + H2O	3.31e+09	0	9.15e+06
5 NH2 + H → NH + H2	5.01e+08	0.5	8.31e+06
6 NH2 + O → NH + OH	2.00e+10	0	4.16e+06
7 NH2 + OH → NH + H2O	3.02e+07	0.68	4.99e+06
8 NH2 + O2 → HNO + OH	5.13e+10	0	1.26e+08
9 NH2 + NO → NNH + OH	6.17e+16	-2.46	7.48e+06
10 NH2 + NO → N2 + H2O	9.12e+16	-2.46	7.48e+06
11 NH2 + HNO → NH3 + NO	1.82e+11	0	4.16e+06
12 NH2 + NNH → NH3 + N2	1.00e+10	0	0.00e+00
13 NNH + M → N2 + H + M	7.24e+13	0	1.88e+08
14 NNH + OH → N2 + H2O	3.02e+10	0	0.00e+00
15 HNO + M → H + NO + M	1.91e+13	0	2.04e+08
16 HNO + OH → NO + H2O	3.63e+10	0	0.00e+00
17 NH + O2 → HNO + O	3.02e+10	0	1.41e+07
18 H2 + OH → H + H2O	2.19e+10	0	2.16e+07
19 H + O2 → OH + O	2.19e+11	0	7.07e+07
20 O + H2 → OH + H	1.82e+07	1	3.74e+07
21 OH + OH → O + H2O	6.31e+09	0	4.16e+06
22 H + O2 + M → HO2 + M	1.51e+12	0	-4.16e+06
23 H + HO2 → OH + OH	2.51e+11	0	8.31e+06
24 O + HO2 → O2 + OH	4.79e+10	0	4.16e+06
25 OH + HO2 → H2O + O2	5.01e+10	0	4.16e+06
26 NO + HO2 → NO2 + OH	3.39e+09	0	-8.31e+05
27 H + NO2 → NO + OH	3.47e+11	0	6.65e+06
28 O + NO2 → NO + O2	1.00e+10	0	2.49e+06
29 NO2 + M → NO + O + M	1.10e+13	0	2.76e+08
30 O + O + M → O2 + M	1.41e+15	-1	1.66e+06
31 NNH + NO → N2 + HNO	2.51e+09	0	0.00e+00

6.3.3 Der siebenstufige Reaktionsmechanismus

Die beiden zuvor beschriebenen zweistufigen und 31-stufigen Reaktionsmechanismen arbeiten mit dem Reduktionsmittel Ammoniak. Im Gegensatz dazu wird bei dem siebenstufigen Reaktionsmechanismus für die Stickoxidreduktion Harnstoff $CO(NH_2)_2$ verwendet. Der zugeführte Harnstoff muss zunächst zersetzt werden, wodurch sich neben Ammoniak NH_3 auch Kohlendioxid CO_2 und Isocyanensäure $HNCO$ bilden. Das SNCR-Verfahren läuft zu einem Teil durch Ammoniak, und zu einem weiteren Teil durch Isocyanensäure ab. Problematisch ist dabei, dass zusätzliche Schadstoffemissionen, wie Distickstoffmonoxid N_2O (Lachgas), Kohlenmonoxid CO , Stickstoffmonoxid NO und Isocyanensäure hervorgerufen werden, was sich durch die relativ langsame Umsetzung der Isocyanensäure begründet. Im praktischen Einsatz ist Harnstoff aber attraktiv, da eine einfachere Handhabung und Speicherung als mit Ammoniak möglich ist.

Der folgende siebenstufige, reduzierte Reaktionsmechanismus von Brouwer et al. [10] entstand auf Basis der vollständigen detaillierten Kinetik nach Miller und Bowman [29]. In Tabelle 13 sind die Reaktionsgleichungen 1 bis 7 des siebenstufigen Mechanismus nach Brouwer et al. [10] aufgelistet.

Tabelle 13: Der siebenstufige reduzierte Mechanismus nach Brouwer et al. [10].

1	$NH_3 + NO \rightarrow N_2 + H_2O + H$
2	$NH_3 + O_2 \rightarrow NO + H_2O + H$
3	$HNCO + M \rightarrow H + NCO + M$
4	$NCO + NO \rightarrow N_2O + CO$
5	$NCO + OH \rightarrow NO + CO + H$
6	$N_2O + OH \rightarrow N_2 + O_2 + H$
7	$N_2O + M \rightarrow N_2 + O + M$

In Abbildung 34 sind die Reaktionspfade des siebenstufigen Reaktionsmechanismus mit dem Reduktionsmittel Harnstoff dargestellt.

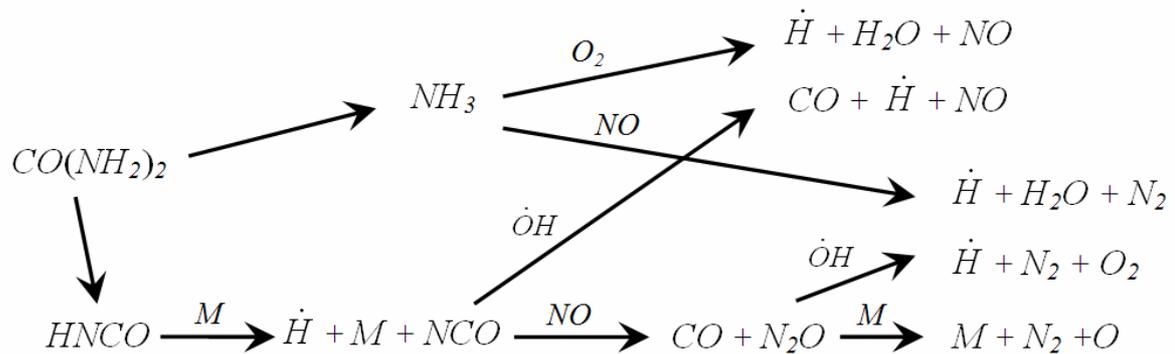


Abbildung 34: Schema des siebenstufigen Reaktionsmechanismus nach Brouwer et al. [10].

Der siebenstufige Mechanismus von Brouwer et al. [10] wird mit Verwendung der Parameter von Nguyen et al. [33] berechnet, die für die CFD-Simulation des SNCR-Verfahrens optimiert sind. Die Parameter des siebenstufigen reduzierten Reaktionsmechanismus wurden von Nguyen et al. [33] unter Voraussetzung geringer Kohlenmonoxid Konzentration (<10 ppm) und hohem Sauerstoffanteil (10-12%) abgeschätzt. Die verwendeten Parameter nach Brouwer et al. [10] sind in Tabelle 5 zusammengefasst.

Tabelle 14: Parameter des siebenstufigen Mechanismus nach Nguyen et al. [33].

Reaktion	$A \left[\frac{1}{sK^\beta}, \frac{m^3}{sK^\beta kmol} \right]$	$\beta (-)$	$E \left[\frac{J}{kmol} \right]$
1 $\text{NH}_3 + \text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	2.13e+01	5.3	2.43e+08
2 $\text{NH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{NO} + \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	8.83e+03	7.65	5.86e+08
3 $\text{HNCO} + \text{M} \rightarrow \text{H} + \text{NCO} + \text{M}$	1.39e+13	0.85	3.45e+08
4 $\text{NCO} + \text{NO} \rightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{CO}$	2.26e+15	0	-2.60e+07
5 $\text{NCO} + \text{OH} \rightarrow \text{NO} + \text{CO} + \text{H}$	3.68e+09	0	0
6 $\text{N}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}_2 + \text{H}$	8.60e+04	0	8.37e+07
7 $\text{N}_2\text{O} + \text{M} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O} + \text{M}$	8.50e+07	0	3.39e+08

6.4 Geometrie und Randbedingungen

Die Reaktionsmechanismen werden zunächst an einer einfachen Geometrie hinsichtlich ihrer Verwendbarkeit zur Beschreibung des SNCR-Verfahrens in CFD-Simulationen bei den Gastemperaturen 850, 900, 950, 1000 und 1050°C untersucht. Diese Temperaturen decken den für das SNCR-Verfahren relevanten Be-

reich ab. Im diesem Abschnitt wird die Geometrie zusammen mit den vorgegebenen Randbedingungen und verwendeten Modellen vorgestellt.

6.4.1 Geometrie

In Abbildung 35 ist die Geometrie dargestellt, an der die Untersuchung der Reaktionsmechanismen ausgeführt wird. Das Rechengebiet hat die Form eines kreiszylindrischen, geraden Rohres. Aufgrund der Größe der Abmessungen und der gegebenen Zelldichte, ist die Struktur des Rechnetzes in der Gesamtdarstellung des Berechnungsgebiets kaum zu erkennen. Im Rohrquerschnitt ist ein unstrukturiertes Rechengitter ausgebildet, das in ähnlicher Form auch bei der Vernetzung der Düse, mit Hilfe der Pave Funktion des Preprocessing Programms Gambit, die hilfreich für die Vernetzung von kreisrunden Flächen ist, erzeugt wurde. Deutlich zu erkennen ist das unstrukturierte Rechnetetz beim Düsenaustritt in Abbildung 20.

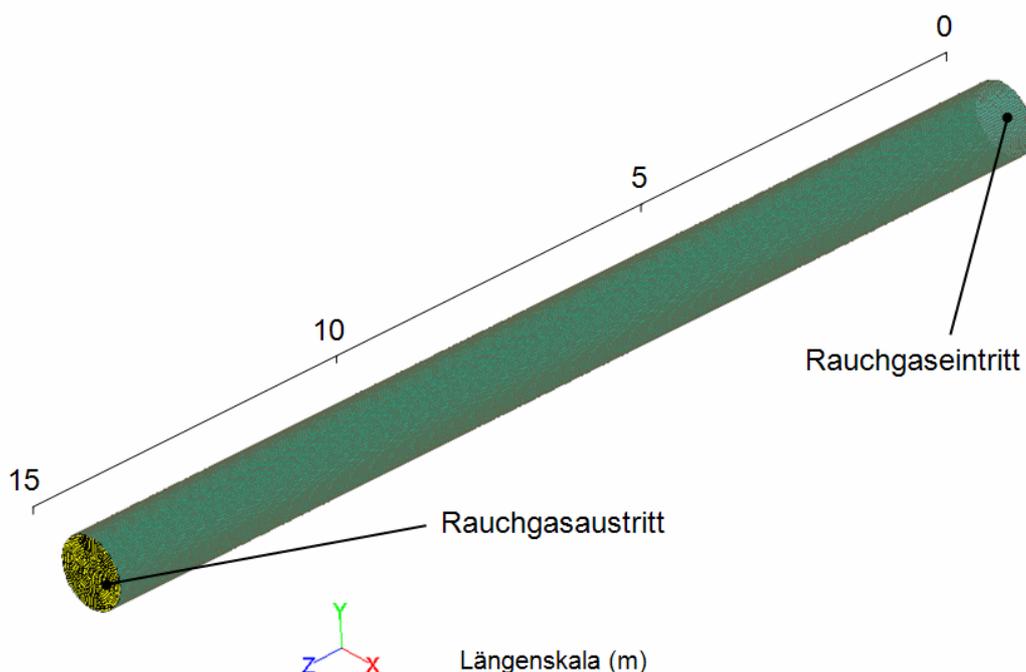


Abbildung 35: Geometrie des Rohres, in dem das SNCR-Verfahren simuliert wird.

Die Abmessungen der Geometrie des Rohres, sowie Qualitätsmerkmale und die Zellenanzahl des Rechengitters sind in Tabelle 15 zusammengestellt.

Tabelle 15: Daten des kreiszylindrischen, geraden Rohres.

Abmessungen	
Länge L_R	15 m
Durchmesser D_R	1 m

Rechennetz	
Anzahl der Zellen	3.2e+05
Maximum Cell Squish	8.3e-02
Maximum Aspect Ratio	2.6

6.4.2 Randbedingungen

Tabelle 16 und Tabelle 17 umfassen sämtliche Randbedingungen, die den CFD-Simulationen der reagierenden Rohrströmung zugrunde liegen. In den Simulationen wird die Turbulenz durch das Standard k, ε -Modell, und die Turbulenz-Chemie-Interaktion durch das Eddy-Dissipation-Concept (EDC) berechnet. In Tabelle 16 sind die Randbedingungen für die Simulation des zweistufigen und des 31-stufigen Mechanismus aufgelistet.

Tabelle 16: Randbedingungen für die Simulation der reagierenden Rohrströmung mit dem zweistufigen und dem 31-stufigen Mechanismus.

Rohreintritt		
Massenstrom \dot{m}_R		0.337 kg/s
Totaltemperatur T_R	850/900/950/1000/1050°C	
Turbulenzintensität I		10%
Hydraulischer Durchmesser D_H		1 m
Massenanteile		
Ammoniak w_{NH_3}		0.000219
Kohlendioxid w_{CO_2}		0.153121
Sauerstoff w_{O_2}		0.071590
Stickstoff w_{N_2}		0.670043
Stickstoffmonoxid w_{NO}		0.000199
Wasser w_{H_2O}		0.104828
Rohraustritt		
Statischer Druck ⁶ p_A		0 Pa

Zu Beginn der Simulation wird das gesamte Strömungsfeld mit den Bedingungen am Rohreintritt initialisiert. Am Rohreintritt sind die Totaltemperatur T_R , eine bestimmte Rauchgaszusammensetzung mit konstantem Massenstrom \dot{m}_R , und die Turbulenzparameter der Strömung vorgegeben. Am Rohraustritt wird ein konstanter Druck p_A festgelegt. Die Mantelfläche der Geometrie wird als adiabate Wand behandelt. In Tabelle 17 sind die Randbedingungen für die Simulation der reagierenden Rohrströmung mit dem siebenstufigen Mechanismus zusammengestellt.

⁶ Der statische Druck wird relativ zum Betriebsdruck (101325 Pa) vorgegeben.

Tabelle 17: Randbedingungen für die Simulation der reagierenden Rohrströmung mit dem siebenstufigen Mechanismus.

Rauchgaseintritt		
Massenstrom \dot{m}_R		0.337 kg/s
Totaltemperatur T_R	850/900/950/1000/1050°C	
Turbulenzintensität I		10%
Hydraulischer Durchmesser D_H		1 m
Massenanteile		
Ammoniak w_{NH_3}		0.0001095
Kohlendioxid w_{CO_2}		0.1531210
Sauerstoff w_{O_2}		0.0715900
Stickstoff w_{N_2}		0.6698758
Stickstoffmonoxid w_{NO}		0.0001990
Wasser w_{H_2O}		0.1048280
Isocyanensäure w_{HNCO}		0.0002767
Rauchgasaustritt		
Statischer Druck ⁷ p_A		0 Pa

Verhältnis Reduktionsmittel zu Stickoxidfracht

Die Reduktion des Stickstoffmonoxids erfolgt beim siebenstufigen Mechanismus durch Ammoniak und dem Produkt von Isocyanensäure. Die Zersetzung des Harnstoffs erfolgt unter der Annahme, dass aus einem Mol Harnstoff ein Mol Ammoniak und ein Mol Isocyanensäure entstehen.



Der Molenstrom \dot{n}_{NH_3} des Ammoniaks berechnet sich durch

⁷ Der statische Druck wird relativ zum Betriebsdruck (101325 Pa) vorgegeben.

$$\dot{n}_{NH_3} = \frac{w_{NH_3} \cdot \dot{m}_R}{M_{NH_3}}. \quad (6.13)$$

w_{NH_3} ist der Massenanteil des Ammoniaks am gesamten Massenstrom \dot{m}_R der Rohrströmung und M_{NH_3} ist die molare Masse des Ammoniaks ($M_{NH_3} = 17.03 \text{e-}03 \text{ kg/mol}$).

Nach Gl. (6.13) berechnet sich $\dot{n}_{NH_3} = \dot{n}_{HNCO} = 2.16 \text{e-}03 \text{ mol/s}$. Der Massenanteil w_{HNCO} der Isocyanensäure berechnet sich durch

$$w_{HNCO} = \frac{\dot{n}_{HNCO} \cdot M_{HNCO}}{\dot{m}_R}, \quad (6.14)$$

mit \dot{m}_R dem Massenstrom, \dot{n}_{HNCO} dem Molenstrom und M_{HNCO} der molaren Masse der Isocyanensäure ($M_{HNCO} = 43.03 \text{e-}03 \text{ kg/mol}$). Das Verhältnis $CO(NH_2)_2$ zu NO wird angegeben als Normalized Stoichiometric Ratio NSR [33] mit

$$NSR = \frac{2 \cdot n_{UREA}}{n_{NO}}, \quad (6.15)$$

wobei n_{UREA} die Stoffmenge Harnstoff und n_{NO} die Stoffmenge Stickstoffmonoxid sind. Das ergibt für diese Randbedingungen ein NSR von 1.94. Der Studie von Nguyen et al. [32] zufolge hat die Reduktionseffizienz von Stickstoffmonoxid im optimalen Temperaturfenster bei einem NSR von zwei ein Maximum. Im Gegensatz zum siebenstufigen Mechanismus, erfolgt die Stickoxidreduktion beim zweistufigen und beim 31-stufigen Reaktionsmechanismus nur durch das Reduktionsmittel NH_3 . Das molare Verhältnis von NH_3 / NO für den zweistufigen und den 31-stufigen Mechanismus berechnet sich durch

$$NSR = \frac{n_{NH_3}}{n_{NO}}, \quad (6.16)$$

wobei mit n_{NH_3} die Stoffmenge Ammoniak und mit n_{NO} die Stoffmenge Stickstoffmonoxid bezeichnet werden. Das ergibt mit den Randbedingungen in Tabelle 16 ein $NSR = 1.94$.

6.5 Ergebnisse

Um das Verhalten des zweistufigen-, des siebenstufigen und des 31-stufigen Mechanismus im optimalen Temperaturfenster beurteilen zu können, werden die Stickstoffmonoxid-Reduktion X_{NO} und der Ammoniak-Schlupf X_{NH_3} nach Gl. (6.17) bis Gl. (6.18) berechnet und mit experimentellen Messwerten von Duo et al. [15], Lee et al. [24] und Nguyen et al. [33] validiert. Dabei werden die Massenanteile der relevanten Spezies nach der Reaktionszeit τ berechnet.

$$X_{NO} = \left(1 - \frac{w_{NO,\tau}}{w_{NO}} \right) \cdot 100\% \quad (6.17)$$

$$X_{NH_3} = \left(\frac{w_{NH_3,\tau}}{w_{NH_3}} \right) \cdot 100\% \quad (6.18)$$

Die Ergebnisse der CFD-Simulationen der reagierenden Rohrströmung werden im Folgenden Abschnitt in Diagrammen vorgestellt, in denen X_{NO} und X_{NH_3} der Reaktionsmechanismen über der Temperatur aufgetragen sind.

6.5.1 Stickstoffmonoxid-Reduktion

In Abbildung 36 ist die berechnete Stickstoffmonoxid-Reduktion mit Verwendung des siebenstufigen Mechanismus nach Brower et al. [10] und Parametern nach Nguyen et al. [33] mit den Temperaturen 850, 900, 950, 1000 und 1050°C eingetragen. Die NO -Reduktion erfolgt bei diesem Mechanismus durch das Reduktionsmittel Harnstoff. Um die Ergebnisse der Simulation zu validieren, wird die berechnete NO -Reduktion mit experimentellen Messwerten von Nguyen et al. [33] verglichen.

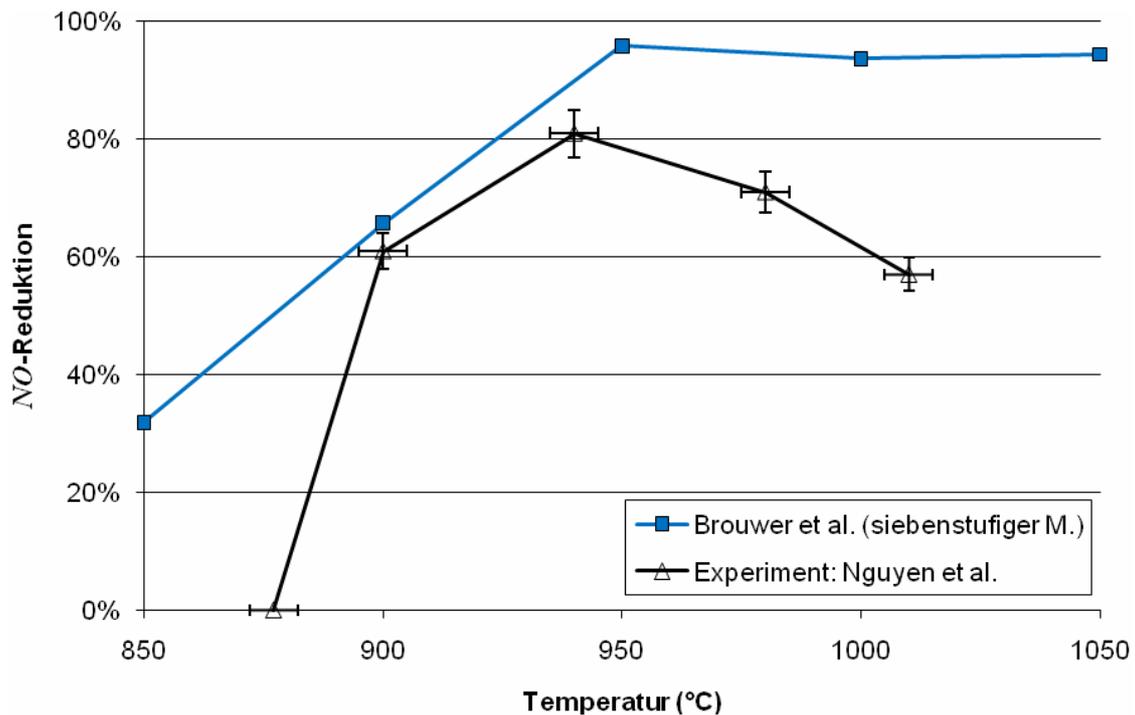


Abbildung 36: Verläufe der Stickstoffmonoxid-Reduktion in Abhängigkeit von der Temperatur des siebenstufigen Mechanismus nach Brouwer et al. [10] mit Parametern nach Nguyen et al. [33] und experimenteller Messwerte nach Nguyen et al. [33].

Die experimentellen Untersuchungen nach Nguyen et al. [33] wurden an einer Pilotanlage mit $NSR = 2$ durchgeführt, für die Simulationen ergibt sich mit den vorgegebenen Randbedingungen $NSR = 1.94$. Die Werte der NO -Reduktion werden bei einer Verweilzeit von 0.7 s berechnet bzw. gemessen. Für die gemessenen Werte ist eine Fehlerbandbreite für NO von $\pm 5\%$ und für die Temperatur von $\pm 5^\circ\text{C}$ angegeben. Die Temperatur für die maximale NO -Reduktion in der Pilotanlage von etwa 80% liegt bei 940°C . Die Verläufe der NO -Reduktion korrelieren im Bereich von 900°C bis 940°C gut. Die Differenzen⁸ zwischen den experimentell bestimmten Messwerten und den Werten des berechneten NO -Reduktionsverlaufs nehmen mit steigender Temperatur von 900°C mit 4%, 940°C mit 8% und 980°C auf 24% zu. In der Studie von Nguyen et al. [33], der die Parameter des siebenstufigen Mechanismus entnommen sind, wird darauf hingewiesen, dass deren CFD-Modell turbulenter reagierender Strömungen auf den relevanten Temperaturbereich von 900 bis 1000°C ausgerichtet ist. Die stark zunehmenden Differenzen außerhalb dieses Temperaturbereichs bestätigt auch diese Untersuchung. Der Einsatz des siebenstufigen Mechanismus mit den verwendeten Parametern ergibt

⁸ Differenz = Betrag des Werts des Simulationsverlaufs – Betrag des experimentellen Messwerts

für den eingeschränkten Temperaturbereich von 900 bis 980°C, oben angegebene, akzeptable Differenzen zwischen den Werten des berechneten *NO*-Reduktionsverlaufs und den experimentellen Messwerten.

In Abbildung 37 ist die Stickstoffmonoxid-Reduktion mit Verwendung des zweistufigen Mechanismus nach Duo et al. [15] und des 31-stufigen Mechanismus für 850, 900, 950, 1000 und 1050°C abgebildet. Diese Reaktionsmechanismen arbeiten mit dem Reduktionsmittel Ammoniak. Die Validierung der Simulationsergebnisse der berechneten *NO*-Reduktion erfolgt mit experimentellen Messwerten von Lee et al. [24].

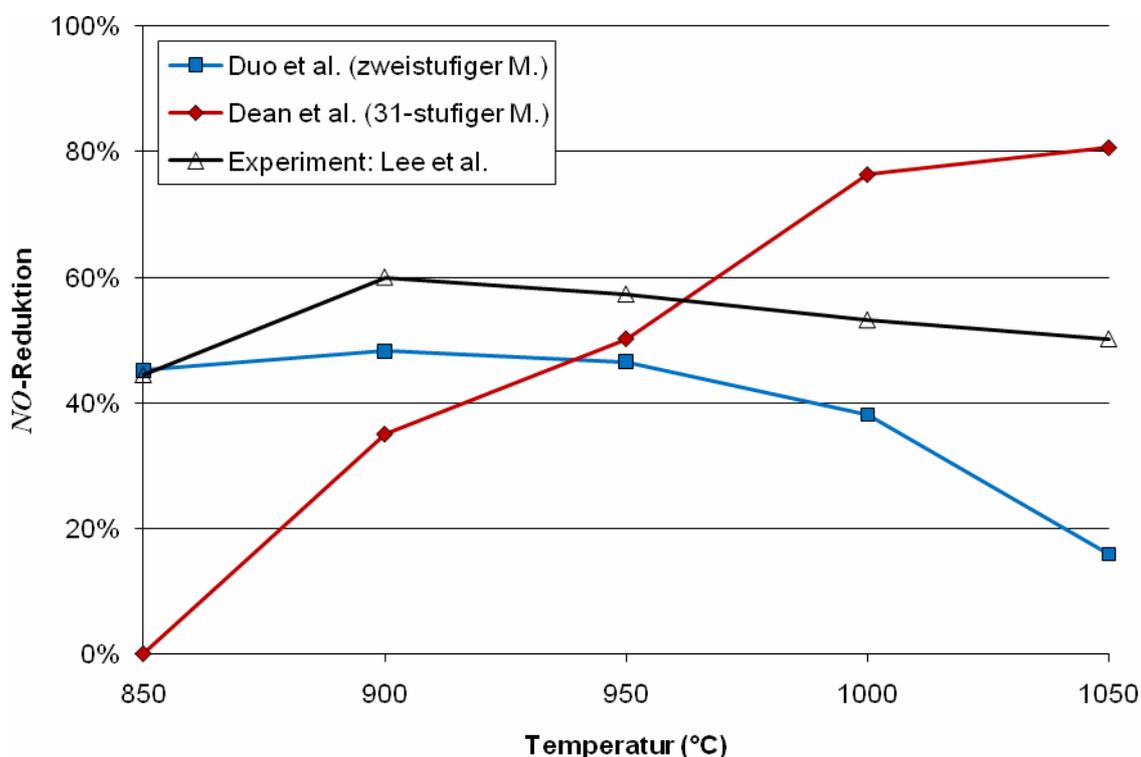


Abbildung 37: Verläufe der Stickstoffmonoxid-Reduktion in Abhängigkeit von der Temperatur des zweistufigen Mechanismus nach Duo et al. [15] und des 31-stufigen Mechanismus nach Dean et al. [13] und experimenteller Messwerte von Lee et al [24].

Die Experimente nach Lee et al. [24] werden in einem Laborreaktor mit $NSR=2.0$ durchgeführt, für die Simulationen ergibt sich mit den vorgegebenen Randbedingungen ein $NSR=1.94$. Die experimentellen Messwerte werden bei einer Verweildauer im Reaktor von 0.86 s ermittelt. Den Ergebnissen der Simulationen liegt eine Verweilzeit von 1 s zugrunde. Die *NO*-Reduktion des Experiments von Lee et al. [24] beträgt im gesamten, abgebildeten Temperaturfenster von 850 bis 1050°C über 44%. Die maximale *NO*-Reduktion von 60% erfolgt bei 900°C Reaktions-

temperatur. Sie liegt am unteren Ende des Temperaturfensters bei 44% und am oberen Ende bei 50%. In Abbildung 37 ist ersichtlich, dass die Ergebnisse des zweistufigen Mechanismus relativ gut mit den Werten des Experiments korrelieren. Im oberen Bereich des Temperaturfensters wird die *NO*-Reduktion gegenüber dem Experiment unterschätzt. Die Differenzen⁸ der *NO*-Reduktion betragen bei 850°C 0.5%, zwischen 900 und 1000°C unter 16%. Größere Differenz von 34% tritt erst bei 1050°C Reaktionstemperatur auf. Der maximale *NO*-Umsatz erfolgt beim zweistufigen Mechanismus ebenfalls bei 900°C. Ein Vergleich der *NO*-Reduktion des 31-stufigen Mechanismus mit dem Experiment zeigt nur bei 950°C relativ gute Übereinstimmung mit einer Differenz von 7%. Bei höheren Reaktionstemperaturen von 1000 und 1050°C überschätzt der 31-stufige Mechanismus die *NO*-Reduktion deutlich. Die maximale *NO*-Reduktion liegt bei diesem Mechanismus am Ende des Temperaturfensters bei 1050°C 30% höher als die des Experiments. Hingegen nimmt im unteren Bereich des Temperaturfensters die *NO*-Reduktion stetig ab bis schließlich bei 850°C keine Reduzierung des Stickstoffmonoxids mehr stattfindet.

Die optimale Entstickungstemperatur für 25 gew.-%iges Ammoniakwasser liegt bei 970°C [47]. Die optimale Eindüsungstemperatur kann jedoch abhängig von der Rauchgaszusammensetzung geringfügig verschoben werden. In Anwesenheit von Kohlenmonoxid *CO*, Sauerstoff *O*₂, Schwefeltrioxid *SO*₃ und Wasserstoff *H*₂ wird der optimale Temperaturbereich zu niedrigeren Temperaturen hin verschoben [47]. In der vorgegeben Rauchgaszusammensetzung der Simulationen sind 7.1 Gew.-% *O*₂ enthalten. Das Experiment wurde mit einem Anteil von 21 Vol.-% *O*₂ durchgeführt.

6.5.2 Ammoniak-Schlupf

Der Verlauf des berechneten Ammoniak-Schlupfs mit Verwendung des siebenstufigen Mechanismus nach Brower et al. [10] und Parametern nach Nguyen et al. [33] mit den Temperaturen 850, 900, 950, 1000 und 1050°C ist in Abbildung 38 eingetragen. Um die Resultate der Berechnungen zu beurteilen, werden die Simulationsergebnisse mit experimentellen Messwerten von Nguyen et al. [33] verglichen.

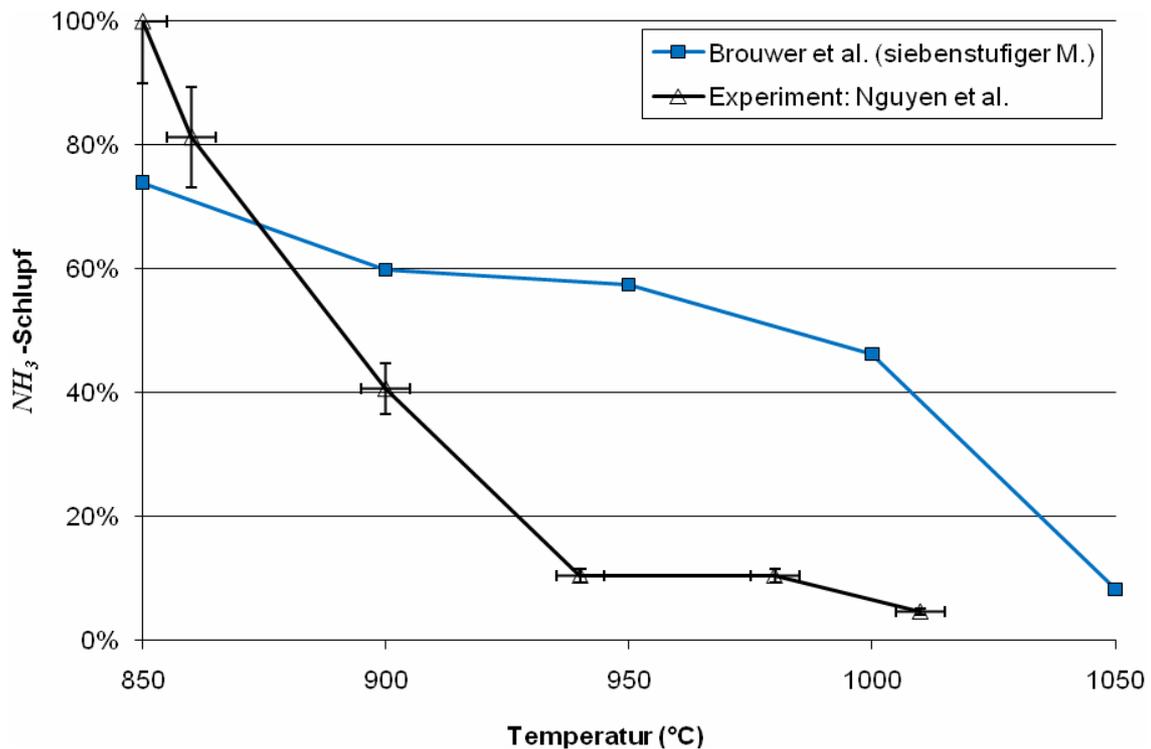


Abbildung 38: Verläufe des Ammoniak-Schlupfs in Abhängigkeit von der Temperatur des siebenstufigen Mechanismus nach Brouwer et al. [10] mit Parametern nach Nguyen et al. [33] und experimenteller Messwerte nach Nguyen et al. [33].

Der Anteil an nicht reagiertem Ammoniak hängt, neben der Durchmischung und der Reaktionszeit, im Wesentlichen vom *NSR* und von der Reaktionstemperatur ab [33]. Die experimentellen Untersuchungen nach Nguyen et al. [33] werden mit *NSR* = 2.0 durchgeführt, für die Simulationen ergibt sich mit den vorgegebenen Randbedingungen *NSR* = 1.94. Die Werte des NH_3 -Schlupfs werden mit einer Verweildauer von 0.7 s berechnet bzw. gemessen. Für die gemessenen Werte gilt die Fehlerbandbreite von $\pm 10\%$ für den NH_3 -Schlupf und $\pm 5^\circ C$ für die Temperatur aufgrund instrumenteller Fehler. Der berechnete Verlauf des Ammoniak-Schlupfs ergibt bei 940, 980 und 1010°C deutlich erhöhte Werte im Vergleich zu den experimentell bestimmten Werten. Bei 900°C beträgt die Differenz⁸ des berechneten Ammoniak-Schlupfs vom experimentellen Messergebnis 20%. Die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen nach Nguyen et al. [33] zeigen ein niedriges Niveau des Ammoniak-Schlupfs von unter 11% ab 940°C. Hingegen weisen die Simulationsergebnisse erst im oberen Bereich des Temperaturfensters bei 1050°C einen geringen Ammoniak-Schlupf (8%) auf. Die Eindüsung von Harnstoff im oberen Ende des Temperaturfensters sichert generell niedrige Ammoniak-Emissionen [20]. Die Berechnung des siebenstufigen Mechanismus nach Brouwer et al. [10]

und Parametern nach Nguyen et al. [33] überschätzt den Ammoniak-Schlupf deutlich um bis zu 48% im Bereich zwischen 940 bis 1010°C.

In Abbildung 39 sind die Verläufe des Ammoniak-Schlupfs des zweistufigen und des 31-stufigen Mechanismus von 850 bis 1050°C dargestellt. Um die Ergebnisse der Berechnungen zu validieren, werden sie mit experimentellen Messwerten von Duo et al. [15] verglichen.

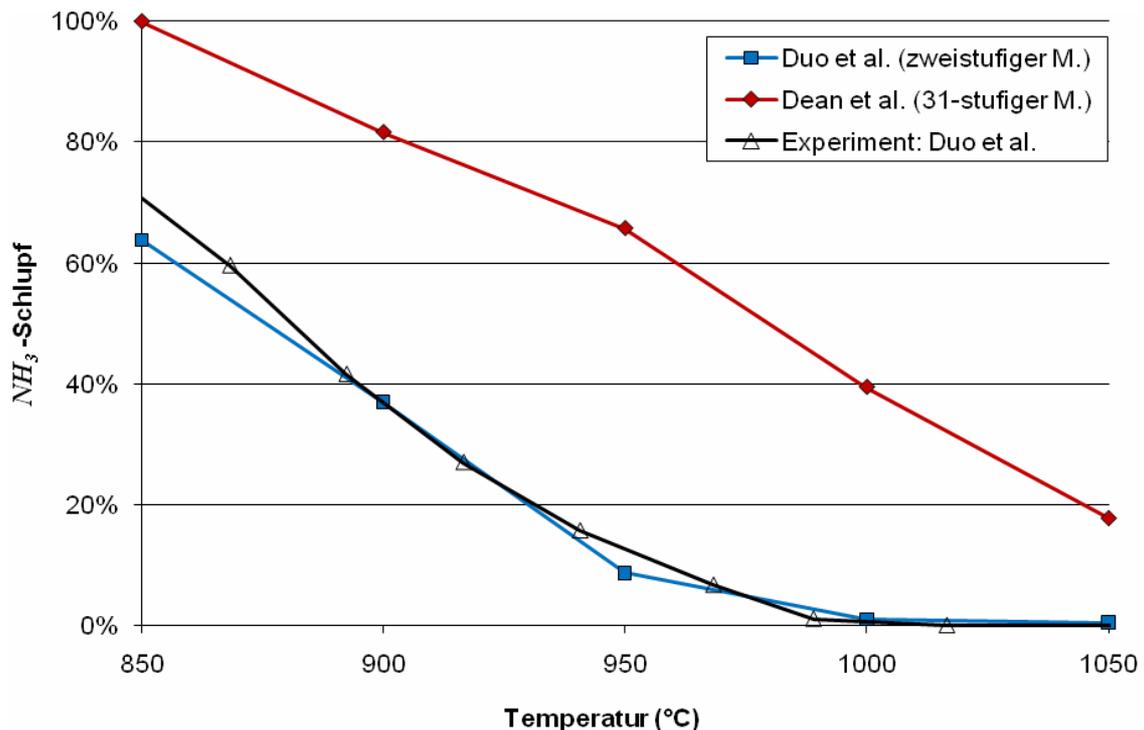


Abbildung 39: Verläufe des Ammoniak-Schlupfs in Abhängigkeit von der Temperatur des zweistufigen Mechanismus nach Duo et al. [15] und des 31-stufigen Mechanismus nach Dean et al. [13] und experimenteller Messwerte von Duo et al. [15].

Die experimentellen Messungen von Duo et al. [15] werden in einem Rohrreaktor mit einem $NSR = 1.64$ und einer Verweildauer von $\tau = 93.3/T$ (K) s durchgeführt. Die Simulationsergebnisse basieren auf einer Verweilzeit von 1 s, unabhängig von der Reaktionstemperatur, und mit $NSR = 1.94$. Die Ergebnisse des Experiments mit den geringen Reaktionszeiten (0.07 bis 0.08 s) sollen zur Validierung herangezogen werden, da der Ammoniak-Schlupf im Experiment bei längeren Reaktionszeiten ab 900°C nur wenig abnimmt. Die experimentelle Messung des NH_3 -Schlupfs beträgt bei 850°C rund 71%, nimmt mit zunehmender Temperatur stetig ab und liegt ab 990°C unter 1%. Die Berechnung der reagierenden Rohrströmung mit dem zweistufigen Mechanismus ergibt eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Messwerten von Duo et al. [15]. Die größte Differenz liegt bei

850°C mit 7% vor. Ab 1000°C liegt der berechnete NH_3 -Schlupf unter 1%. Die Simulation der Rohrströmung mit Verwendung des 31-stufigen Reaktionsmechanismus ergibt für den NH_3 -Schlupf überhöhte Werte im gesamten Temperaturfenster. Der Ammoniak-Schlupf nimmt von 850 bis 1050°C stetig ab. Dieses Verhalten kann als richtig eingestuft werden, jedoch liegt das Niveau deutlich über dem der experimentellen Messwerte. Der geringste NH_3 -Schlupf wird bei 1050°C mit 18% berechnet. Bei 950°C liegt er mit 66% wesentlich über dem Messwert, der mit dieser Reaktionstemperatur 13% beträgt.

6.5.3 Einfluss der Verweilzeit

In den folgenden beiden Diagrammen sind die NO -Reduktion und der NH_3 -Schlupf des zweistufigen und des 31-stufigen Reaktionsmechanismus mit einer und zwei Sekunden Verweildauer im Rohr dargestellt. Der zweistufige Mechanismus nach Duo et al. [15] und der 31-stufige Mechanismus nach Dean et al. [13] arbeiten mit dem Reduktionsmittel Ammoniak und werden für die Beschreibung des Von Roll SNCR-Verfahrens untersucht. Die NO -Reduktion und der NH_3 -Schlupf werden bei den Temperaturen 850, 900, 950, 1000 und 1050°C mit $NSR = 1.94$ berechnet. In realen Kesselanlagen variiert die Verweilzeit der Rauchgase im optimalen Temperaturfenster abhängig von der Rauchgasgeschwindigkeit und vom Temperaturgradienten im Kessel.

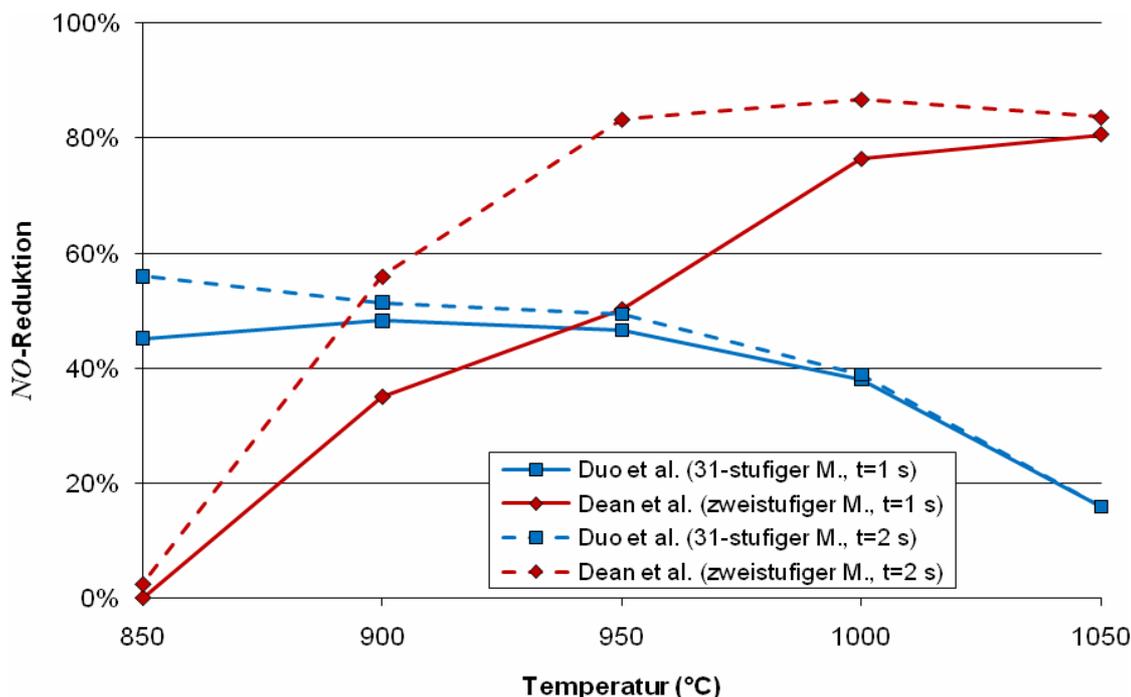


Abbildung 40: Verlauf der Stickstoffmonoxid-Reduktion X_{NO} des zweistufigen und des 31-stufigen Mechanismus mit Verweilzeiten $t=1$ und 2 s.

Die NO -Reduktion zeigt beim 31-stufigen Mechanismus nach Dean et al. [13] eine starke Abhängigkeit von der Verweilzeit der reagierenden Rohrströmung. Mit zunehmender Verweilzeit von $t=1$ bis 2 s steigt X_{NO} bei den Temperaturen von 850°C von 0.1 auf 2.5% , bei 950°C von 50.2 auf 83.3% und bei 1050°C von 80.6 auf 83.7% . X_{NO} nimmt beim 31-stufigen Mechanismus mit steigender Temperatur und längerer Verweilzeit zu. Die maximale NO -Reduktion verschiebt sich bei längerer Verweildauer Richtung niedrigere Temperatur. Bei dem zweistufigen Mechanismus nach Duo et al. [15] ist X_{NO} über das gesamte Temperaturfenster nur mäßig von der Verweildauer zwischen 1 und 2 s abhängig. Die Differenzen nehmen mit zunehmender Reaktionstemperatur stetig ab. Bei der Temperatur 850°C beträgt die NO -Reduktion mit Verweilzeit $t=1$ und 2 s, 45.2 und 56.0% . Ab 900°C liegen die Differenzen unter 3.2% . Die maximale NO -Reduktion verschiebt sich bei längerer Reaktionszeit ebenfalls Richtung niedrigere Temperatur.

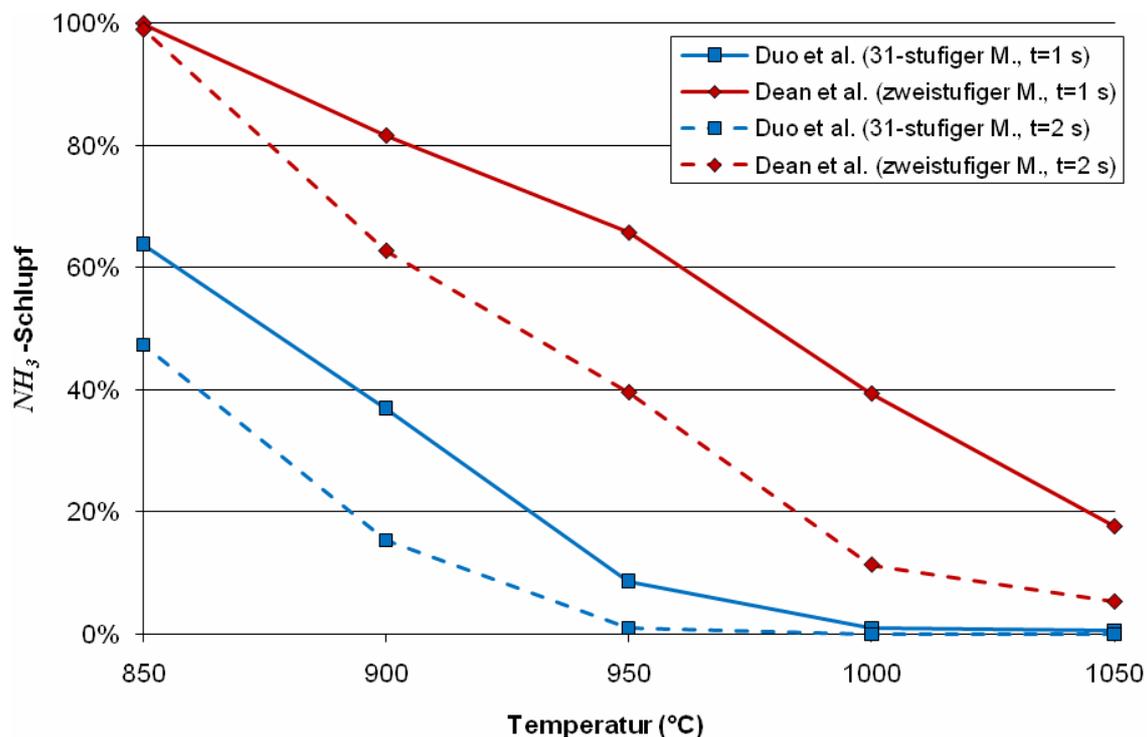


Abbildung 41: Verlauf des Ammoniak-Schlupfs X_{NH_3} des zweistufigen und des 31-stufigen Mechanismus mit Verweilzeiten $t=1$ und 2 s.

Der Ammoniak-Schlupf X_{NH_3} nimmt beim zweistufigen Mechanismus nach Duo et al. [15] und beim 31-stufigen Mechanismus nach Dean et al. [13] mit zunehmender Verweilzeit im gesamten Temperaturfenster ab. Beim zweistufigen Mechanismus reduziert sich X_{NH_3} mit zunehmender Verweilzeit $t=1$ bis 2 s bei den Temperaturen von 850°C von 63.8 auf 47.3% und bei 950°C von 8.7 auf 1.0% . Das Niveau des Ammoniak-Schlupfs X_{NH_3} liegt beim 31-stufigen Mechanismus deutlich über dem des zweistufigen Mechanismus. Beim 31-stufigen Mechanismus sinkt X_{NH_3} mit zunehmender Verweilzeit $t=1$ bis 2 s bei den Temperaturen von 850°C von 100.0 auf 99.0% , bei 950°C von 65.7 auf 39.6% und bei 1050°C von 17.7 auf 5.3% .

Für die Berechnung der Kesseldurchströmung mit chemischen Reaktionen im folgenden Kapitel wird der zweistufige Mechanismus nach Duo et al. [15] verwendet. Die durchgeführten Untersuchungen mit dem relativ einfachen, zweistufigen Mechanismus ergeben akzeptable Übereinstimmungen mit den experimentellen Messungen von Lee et al. [24] und Duo et al. [15]. Hingegen ergibt der aufwendigere, 31-stufige Mechanismus nach Dean et al. [13] trotz des größeren Rechen-

aufwands vergleichsweise schlechtere Korrelationen der NO -Reduktion und des NH_3 -Schlupfs mit den experimentellen Messwerten, als der zweistufige Mechanismus. Der siebenstufige Mechanismus nach Brouwer et al. [10] mit Parametern nach Nguyen et al. [33] arbeitet mit Harnstoff als Reduktionsmittel, das beim Von Roll SNCR-Verfahren nicht zur Anwendung kommt. Die Verwendung von Harnstoff als Reduktionsmittel bringt aufgrund der einfacheren Handhabung und verfahrenstechnischer Aspekte, die in der Einleitung dieser Arbeit angeführt sind, mitunter Vorteile gegenüber dem Reduktionsmittel Ammoniak mit sich. Die Untersuchungen mit dem siebenstufigen Mechanismus können für künftige Verfahrensentwicklungen hilfreich sein.

Für die CFD-Berechnung wird vereinfacht eine konstante Temperatur an der Wandaußenseite als Randbedingung festgelegt. Durch Aufsummieren der Wärmetransportwiderstände der einzelnen Schichten, für die mittlere Schichtdicken der Rohrwand, der SiC-Masse, der Rohrwandplatte und der Verschmutzung festgelegt sind, wird ein gesamter Wärmetransportwiderstand des Wandaufbaus berechnet und als Randbedingung für die CFD-Simulation vorgegeben. Das Simulationsprogramm bietet die Möglichkeit, mit dem Modell der sogenannten „thin walls“, für die als Wände definierten Flächen des Rechnetzes, eine räumliche Ausdehnung vorzugeben, ohne diese diskretisieren zu müssen. Die numerische Auflösung der einzelnen Schichten der Wand, sowie die Abbildung des Wärmeübergangs in den Verdampferrohren, würden den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Durch Vorgabe der Temperatur an der Wandaußenseite, des Emissionskoeffizienten an der Wandinnenseite, sowie den Stoffgrößen der Wand, kann der Wärmetransport normal durch die Kesselwand berechnet werden. Am Ende dieses Kapitels wird sich zeigen, dass der Großteil der Wärmeübertragung aufgrund von Wärmestrahlung hervorgerufen wird. Es sei hier erwähnt, dass der Wärmetransport in Vertikalrichtung in der Kesselwand durch das Modell der „thin walls“ nicht abgebildet werden kann. Für die Berechnung von Wärmeübertragungsvorgängen ist die Lösung der Erhaltungsgleichung für die gesamte Energie [3] erforderlich, die in Abschnitt 3.1.3 genauer diskutiert wurde und hier nochmals angeführt wird, um im Speziellen auf den darin enthaltenen Quellterm S_h einzugehen.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \left(\vec{v}(\rho E + p) \right) = \nabla \left(k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\tau}_{eff}) \right) + S_h$$

Hier bedeuten ρ die Dichte des Fluids, E die gesamte Energie, p den im Medium vorherrschenden Druck und t die Zeit. Die Größe k_{eff} steht für die effektive Wärmeleitfähigkeit, die sich aus der Wärmeleitfähigkeit des Fluides k und der turbulenten Leitfähigkeit k_t zusammensetzt. \vec{J}_j beschreibt die Diffusionsströme der Spezies j . Die ersten drei Terme auf der rechten Seite geben den Energietransport aufgrund von Wärmeleitung und turbulenter Konvektion, Speziesdiffusion so-

wie viskoser Dissipation an. S_h steht allgemein für Quellterme in der Energiegleichung, die beispielsweise aufgrund von chemischen Reaktionen oder durch Wärmestrahlung entstehen können.

Der Quellterm $S_{h,r}$ aufgrund von chemischen Reaktionen, die in diesem Abschnitt berechnet werden, formuliert sich durch die Beziehung [3]

$$S_{h,r} = - \sum_j \frac{h_j^0}{M_j} R_j. \quad (7.1)$$

Hier ist h_j^0 die spezifische Standard-Bildungsenthalpie, M_j die molare Masse und R_j die volumetrische Produktions- bzw. Zersetzungsrate der Spezies j nach Gl. (6.7). Die Energieübertragung aufgrund von Strahlung geht ebenfalls in den Quellterm ein. Das verwendete Strahlungsmodell wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

Zur Berechnung der Strahlung wird das im verwendeten CFD-Programm implementierte P1-Modell herangezogen. Die strahlungsbedingte Wärmestromdichte q_r berechnet sich durch [3]

$$q_r = - \frac{1}{3(a + \sigma_s) - C\sigma_s} \nabla G, \quad (7.2)$$

mit dem Absorptionskoeffizienten a , dem Streukoeffizienten σ_s , dem linearen anisotropen Phasenkoeffizienten C und der einfallenden Strahlung G , deren Transportgleichung wie folgt dargestellt wird [3]

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla G) - aG + 4an^2\sigma T^4 = S_G. \quad (7.3)$$

Hier ist n der Brechungsindex des Mediums, σ die Stefan-Boltzmann-Konstante ($\sigma = 5.669 \times 10^{-8} \text{ (W/m}^2\text{K}^4)$), T die Temperatur, und S_G eine Strahlungsquelle, die der Benutzer vorgeben kann. Mit $q_r = -\Gamma \nabla G$ kann für die Berechnung der lokalen Strahlungsstromdichte die Gleichung

$$-\nabla \cdot q_r = aG - 4an^2\sigma T^4 \quad (7.4)$$

gelöst werden. Der Term $-\nabla \cdot q_r$ kann direkt in die Erhaltungsgleichung für die Energie eingeführt werden, um den strahlungsbedingten Energietransport zu inkludieren. Der Absorptionskoeffizient a wird als variable Größe eingegeben, da dieser abhängig von der Schichtdicke, vom Druck und von den Konzentrationen der Bandenstrahler, der Spezies Wasser und Kohlendioxid ist. Im CFD-Programm ist mit dem sogenannten Modell der „weighted-sum-of-gray-gases“ (WSGGM) die Berechnung der Strahlung mit variablen Absorptionskoeffizienten möglich, welches eine Verbesserung des Graugasmodells ist und teils spezifische Bandbreiten berücksichtigt. Eine ausführliche Beschreibung dieses Modells findet sich in Fluent Theory Guide [3]. Die Berechnung mit dem WSGGM hat sich in Verbindung mit der Option „domain-based“ als günstig erwiesen.

7.3 Geometrie und Randbedingungen

Die Berechnungen in diesem Kapitel werden an der Testgeometrie mit jenem Rechenetz durchgeführt, das bereits in Kapitel 5 vorgestellt wurde. Sämtliche Randbedingungen mit den verschiedenen Rauchgaseintrittstemperaturen bei 4 bar Düsenvordruck (absolut) sind in diesem Abschnitt angeführt.

7.3.1 Geometrie

Die geometrischen Abmessungen der Testgeometrie, sowie der Düse sind in Tabelle 18 aufgelistet.

Tabelle 18: Geometrische Abmessungen der Testgeometrie.

Kesselsegment

Gesamthöhe	7000 mm
Breite	3000 mm
Tiefe	500 mm

Düse⁹

Düsenlänge	520 mm
Eintrittsdurchmesser D	12 mm
Austrittsdurchmesser d	4 mm
Lage der Eindüsungsstelle y	1000 mm

Detaillierte Informationen zu Rechenetzgröße, sowie zu Struktur und Qualitätsmerkmalen des Rechengitters, sind in Kapitel 5 ersichtlich.

⁹ Durch Ausnützen der Symmetrieeigenschaften wurde die Düse im Längsschnitt geteilt und nur eine Hälfte modelliert.

7.3.2 Randbedingungen

Die Randbedingungen der Simulationen sind in Tabelle 19 und Tabelle 20 zusammengestellt.

Tabelle 19: Randbedingungen der Simulationen.

Rauchgaseintritt	
Massenstrom \dot{m}_{RG}	1.38 kg/s
Totaltemperatur T_{RG}	800/900/1000°C
Turbulenz-Intensität I	3.66%
Hydraulischer Durchmesser D_H	6.9 m
Massenanteile	
Kohlendioxid w_{CO_2}	0.153121
Sauerstoff w_{O_2}	0.071590
Stickstoff w_{N_2}	0.670262
Stickstoffmonoxid w_{NO}	0.000199
Wasser w_{H_2O}	0.104828
Düseneintritt	
Totaldruck ¹⁰ $p_{0,tot}$	299781 Pa
Totaltemperatur $T_{0,tot}$	178°C
Turbulenz-Intensität I	4.71%
Hydraulischer Durchmesser D_H	0.012 m
Massenanteile	
Ammoniak w_{NH_3}	0.0645
Wasser w_{H_2O}	0.9355
Rauchgasaustritt	
Statischer Druck ¹⁰ p_A	0 Pa

¹⁰ Totaldruck und statischer Druck werden relativ zum Betriebsdruck (101325 Pa) vorgegeben.

Die Randbedingungen für die Kesselwand sind in Tabelle 20 aufgelistet.

Tabelle 20: Randbedingungen für die Kesselwand.

Kesselwand	
Emissionskoeffizient Wandinnenseite ε_W	0.78
Dichte ρ_W	2600 kg/m ³
Spezifische Wärmekapazität $c_{p,W}$	1000 J/kgK
Temperatur der Wandaußenseite $T_{W,a}$	269°C
Wandstärke s	36.9 mm
Wärmeleitfähigkeit λ_W	6.33 W/mK

7.4 Modelle und Reaktionsmechanismus

In diesem Abschnitt werden die in den Simulationen verwendeten Modelle, sowie weitere Einstellungen des Simulationssettings und der verwendete Reaktionsmechanismus vorgestellt.

7.4.1 Modelle und Einstellungen

In Tabelle 21 sind weitere Einstellungen und Modelle des Simulationssettings zusammengestellt.

Tabelle 21: In der CFD-Simulation eingesetzte Modelle und Einstellungen.

Absorptionskoeffizienten a	WSGGM (domain-based)
Dichteberechnung	thermische Zustandsgleichung idealer Gase
Gravitationsfeld	vorgegeben ($y = -9.81 \text{ m/s}^2$)
Strahlungsmodell	P1-Modell
Turbulenzmodell	Realizable k, ε -Modell
Turbulenz-Chemie-Interaktion	EDC-Modell

7.4.2 Reaktionsmechanismus

Für die Beschreibung der Reaktionskinetik des SNCR-Verfahrens in der Testgeometrie kommt der zweistufige Reaktionsmechanismus von Duo et al. [15] zum Einsatz, der in Kapitel 6 detaillierter behandelt wurde. Dieser Mechanismus basiert auf zwei empirischen Reaktionen. Eine beschreibt die Reduktion von Stickstoffmonoxid durch Ammoniak zu Stickstoff, und die andere die Oxidation von Ammoniak zu Stickstoffmonoxid. Die Parameter des zweistufigen Reaktionsmechanismus für die Formulierung der Geschwindigkeitskonstanten mit dem Arrhenius-Ansatz Gl. (6.4) sowie die Reaktionsgleichungen sind in Tabelle 11 zusammengestellt.

Tabelle 22: Parameter des zweistufigen Reaktionsmechanismus.

Reaktion	$A \left[\frac{1}{s}, \frac{m^3}{skmol} \right]$	$\beta (-)$	$E \left[\frac{J}{kmol} \right]$
$NO + NH_3 + \frac{1}{4} O_2 \rightarrow N_2 + 1\frac{1}{2} H_2O$	2.45e+17	0	2.44e+08
$NH_3 + 1\frac{1}{4} O_2 \rightarrow NO + 1\frac{1}{2} H_2O$	2.21e+14	0	3.17e+08

7.5 Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der CFD-Simulationen des SNCR-Verfahrens in der Testgeometrie mit dem implementierten zweistufigen Reaktionsmechanismus nach Duo et al. [15] mit verschiedenen Rauchgaseintrittstemperaturen vorgestellt. In erster Linie sollen hier die NO -Reduktion und der NH_3 -Schlupf, sowie die Temperaturabnahme der Rauchgase beim Durchströmen des Kesselsegments aufgezeigt werden. Ferner werden die Vektoren der Absolutgeschwindigkeit in verschiedenen Auswertungsebenen abgebildet, um die Strömungsbewegungen im Kessel zu zeigen. Am Ende dieses Abschnitts wird auf den Wärmetransport durch die Kesselwand, sowie auf das Temperaturprofil im Kesselsegment näher eingegangen.

7.5.1 Ammoniak-Schlupf und Stickstoffmonoxid-Reduktion

In diesem Abschnitt werden die Stickstoffmonoxid-Reduktion X_{NO} und der Ammoniak-Schlupf X_{NH_3} bei 800, 900 und 1000°C Rauchgaseintrittstemperatur T_{RG}

in mehreren horizontalen Ebenen entlang der Kesselhöhe y nach Gl. (7.5) und (7.6) berechnet.

$$X_{NO} = \left(1 - \frac{\dot{m}_{NO,y}}{\dot{m}_{NO}} \right) \cdot 100 \quad (7.5)$$

$$X_{NH_3} = \left(\frac{\dot{m}_{NH_3,y}}{\dot{m}_{NH_3}} \right) \cdot 100 \quad (7.6)$$

NSR beträgt mit den definierten Randbedingungen der folgenden Simulationen 1.4. In Abbildung 43 sind die Verläufe der NO -Reduktion, des NH_3 -Schlupfs, sowie die Abnahme der Rauchgastemperatur beim Durchströmen des Kessel-segments mit der Rauchgaseintrittstemperatur $T_{RG} = 900^\circ\text{C}$ dargestellt.

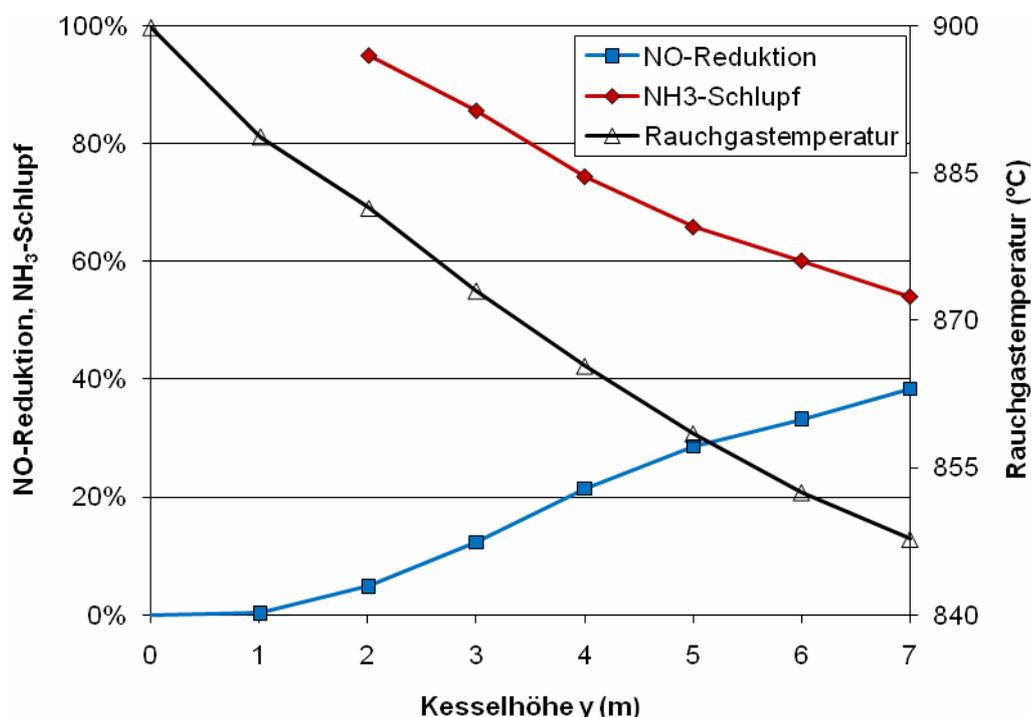


Abbildung 43: Verläufe der Stickstoffmonoxid-Reduktion, des Ammoniak-Schlupfs und der Rauchgastemperatur ($^\circ\text{C}$) mit 900°C Rauchgaseintrittstemperatur entlang der Kesselhöhe y (m).

Die Stickstoffmonoxid-Reduktion nimmt mit fortschreitender Durchströmung der Testgeometrie stetig zu. Sie beträgt am Rauchgasaustritt 38.3%. Der Ammoniak-

Schlupf nimmt hingegen mit zunehmenden Abstand von der Eindüsungsebene stetig ab und beträgt 54.1% am Rauchgasaustritt, an der Stelle $y=7$ m. Die Rauchgase kühlen von 900°C am Rauchgaseintritt auf eine flächengemittelte Temperatur von 848°C am Rauchgasaustritt ab. Die Temperaturabnahme der Rauchgase ergibt einem mittleren Temperaturgradienten von 7.4 K/m. Die Profile der NO -Reduktion und des NH_3 -Schlupfs am Rauchgasaustritt deuten darauf hin, dass die Reaktionen noch nicht vollständig abgelaufen sind. In Abbildung 44 sind die Verläufe der NO -Reduktion, des NH_3 -Schlupfs und die Abnahme der Rauchgastemperatur beim Durchströmen des Kessels mit der Rauchgaseintrittstemperatur $T_{RG}=1000^{\circ}\text{C}$ dargestellt.

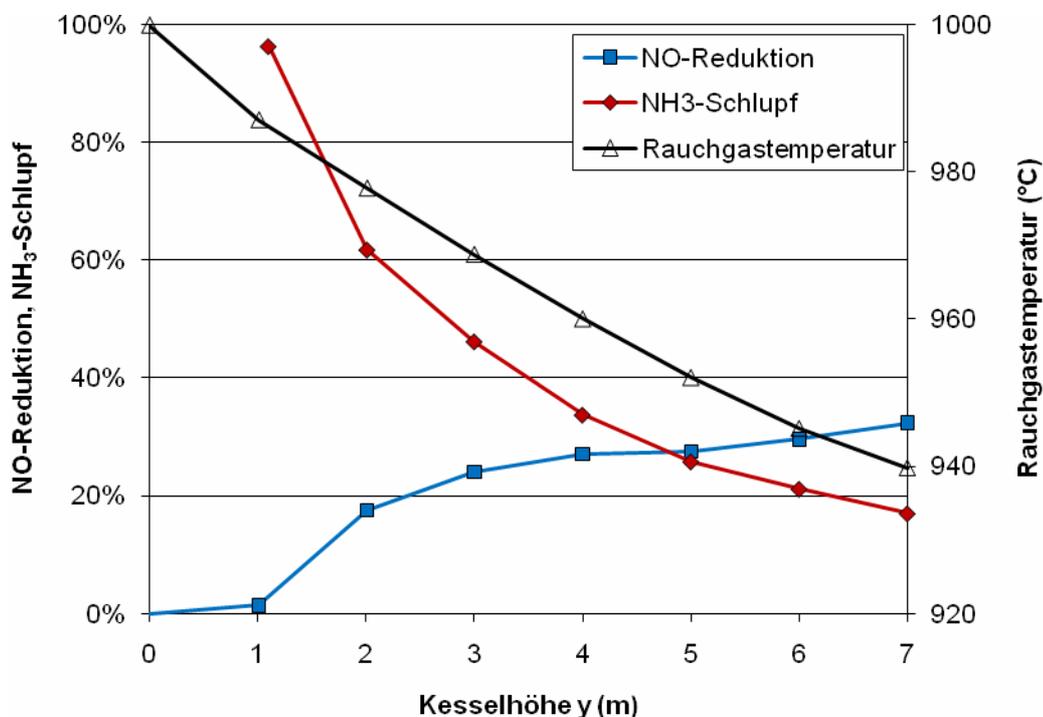


Abbildung 44: Verläufe der Stickstoffmonoxid-Reduktion, des Ammoniak-Schlupfs und der Rauchgastemperatur ($^{\circ}\text{C}$) mit 1000°C Rauchgaseintrittstemperatur entlang der Kesselhöhe y (m).

Die NO -Reduktion findet unmittelbar oberhalb der Eindüsungsebene, von $y=1$ bis 2 m, im Vergleich zum vorigen Fall mit $T_{RG}=900^{\circ}\text{C}$ verstärkt statt. Sie nimmt anschließend jedoch wieder ab und liegt am Rauchgasaustritt mit 32.4% unter der erreichten NO -Reduktion bei $T_{RG}=900^{\circ}\text{C}$. Der NH_3 -Schlupf nimmt während der Durchströmung des Kesselsegments erheblich ab und beträgt bei $y=7$ m 17% . Die Verläufe der NO -Reduktion und des NH_3 -Schlupfes deuten darauf hin, dass im

Vergleich zum Fall $T_{RG}=900^{\circ}\text{C}$ ein größerer Anteil des Ammoniaks oxidiert wird. Im Falle $T_{RG}=1000^{\circ}\text{C}$ liegt ein mittlerer Temperaturgradient von 8.6 K/m vor. In Abbildung 45 sind die Verläufe der NO -Reduktion, des NH_3 -Schlupfs und die Abnahme der Rauchgastemperatur beim Durchströmen des Kessels bei $T_{RG}=800^{\circ}\text{C}$ dargestellt.

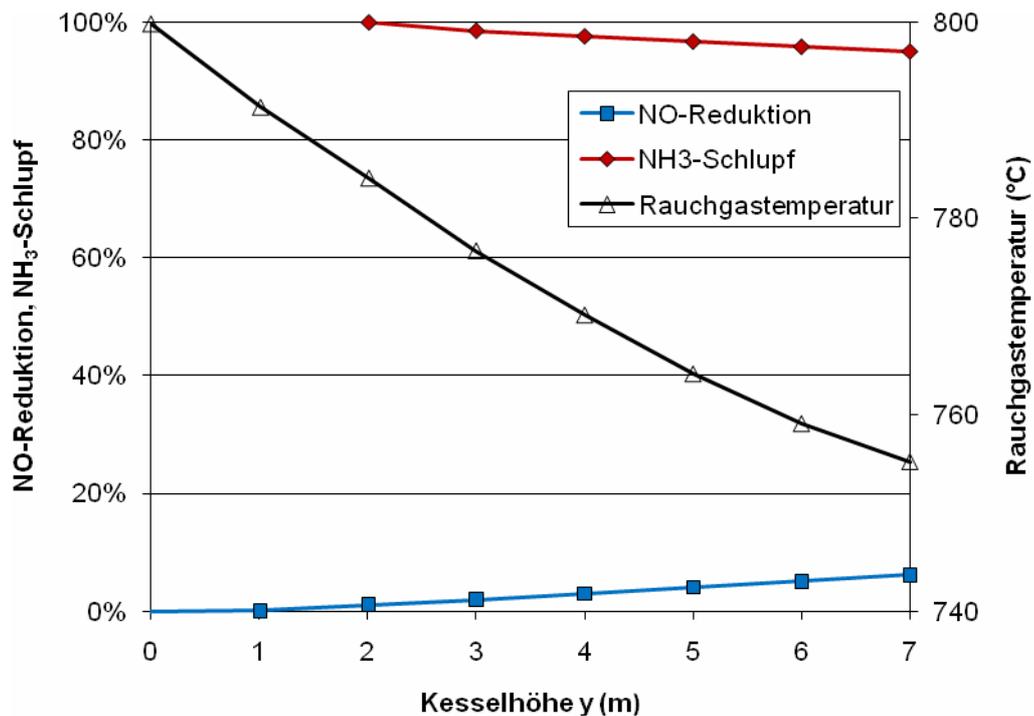


Abbildung 45: Verläufe der Stickstoffmonoxid-Reduktion, des Ammoniak-Schlupfs und der Rauchgastemperatur ($^{\circ}\text{C}$) mit 800°C Rauchgaseintrittstemperatur entlang der Kesselhöhe y (m).

Der vorliegende Fall entspricht der Eindüsung bei zu geringer Temperatur. Bei 800°C Rauchgaseintrittstemperatur laufen die Reaktionen für die NO -Reduktion zwar ab, aber sehr träge. Während der Durchströmung des Kesselsegments werden 6.1% NO reduziert. Der NH_3 -Schlupf beträgt am Rauchgasaustritt noch 94.9%. Die Rauchgase kühlen während der Durchströmung des Kesselsegments von 800 auf 755°C ab.

7.5.2 Verweilzeit der Rauchgase

Am Rauchgaseintritt stellt sich aufgrund der Randbedingungen in Tabelle 6 eine Strömungsgeschwindigkeit von 3.1 m/s ein. Die Verweilzeit der Rauchgase im optimalen Temperaturfenster beim Durchströmen des 7 m hohen Kessels kann mit

der angegebenen Strömungsgeschwindigkeit nur abgeschätzt werden, da es im Kessel u.a. aufgrund der seitlichen Eindüsung, der Berücksichtigung der Schwerkraft, und der starken Temperaturabnahme der Rauchgase an der Kesselwand zu Strömungsbewegungen kommt, die zu Rückströmungsgebiete entlang der Kesselwand und zu weiteren Bewegungen führen, die beispielsweise in Abbildung 22 und Abbildung 25 dargestellt sind. Daher können sich für Fluidteilchen Abweichungen in der Verweildauer ergeben, die durch Rückströmungsgebiete treten. Im Falle der Durchströmung des Kessels mit konstanter Rauchgaseintrittsgeschwindigkeit beträgt die Verweildauer im Kesselsegment 2.3 s.

7.5.3 Profile des Ammoniak-Massenanteils

Zur besseren Veranschaulichung der Ergebnisse werden in den folgenden Konturplots vier Kesselsegmente abgebildet. Einige Beschreibungen beziehen sich auf das Kesselsegment ausgehend vom Koordinatenursprung, gelten jedoch spiegelbildlich auch für die anderen drei Kesselsegmente. Die vorliegenden Profile bilden sich mit den Randbedingungen 4 bar Düsenvordruck und 900°C Rauchgaseintrittstemperatur aus. Das Profil des Ammoniak-Massenanteils in der Symmetrieebene im Vertikalschnitt durch die Düsen ist in Abbildung 46 dargestellt.

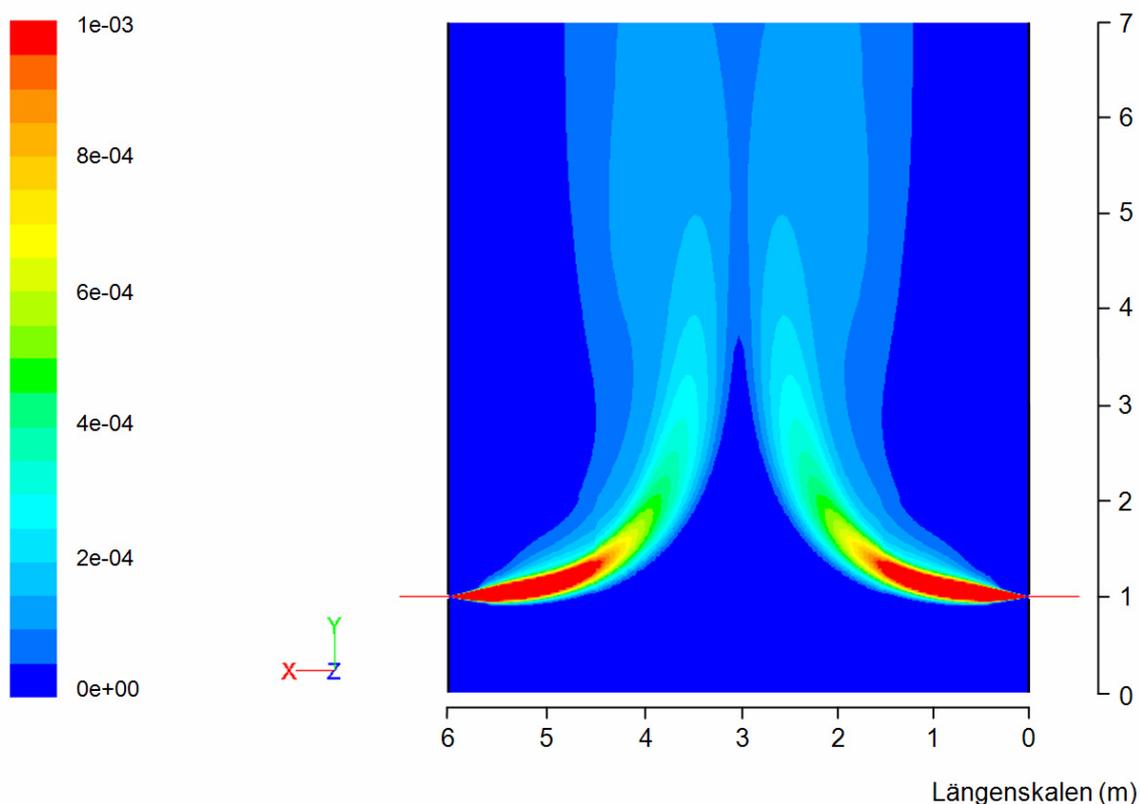


Abbildung 46: Profil des Ammoniak-Massenanteils im Vertikalschnitt in der Symmetrieebene bei $z=0$ m mit chemischen Reaktionen.

Der Eindüsungsstrahl des Wasserdampf-Ammoniak-Gemisches weist hohe Massenanteile des beigemengten Reduktionsmittels Ammoniak von über 1000 ppm in einem Bereich auf, der vom Düsenaustritt bis zirka 1.8 m in den Kessel hinein reicht. Die hier veranschaulichte gegenüberliegende Eindüsung zeigt, dass das zugeführte Reduktionsmittel trotz ablaufender Reaktionen in einer Höhe von rund 2.8 m über der Eindüsungsstelle die Kesselmitte erreicht. Es sei hier erwähnt, dass die Düsenlängsachse bei allen durchgeführten Simulationen normal auf die Kesselwand steht. Eine erkennbare Abnahme des Ammoniak-Massenanteils verglichen mit der Berechnung ohne Reaktionskinetik ist ab einem Vertikalabstand zur Eindüsungsstelle von 3 m ersichtlich (vgl. Abbildung 22). Die Ablenkung und somit die Eindringtiefe des Eindüsungsstrahls in den Kesselraum hängt von der Rauchgaseintrittsgeschwindigkeit ab. In Abbildung 47 ist das Profil des Ammoniak-Massenanteils mit chemischen Reaktionen im Vertikalschnitt bei der Koordinate $z=0.5$ m dargestellt.

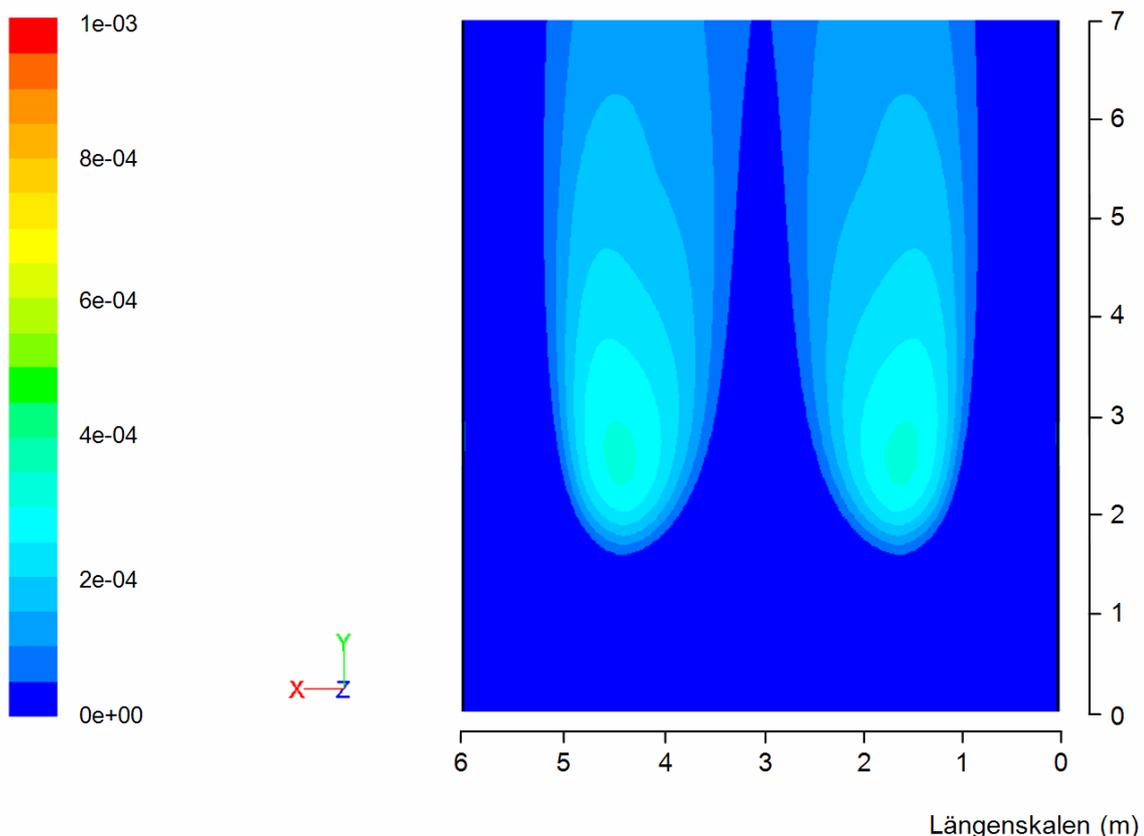


Abbildung 47: Profil des Ammoniak-Massenanteils im Vertikalschnitt bei $z=0.5$ m mit chemischen Reaktionen.

Das Profil des Ammoniak-Massenanteils zeigt, dass sich Regionen mit hohem Ammoniak-Massenanteilen von etwa 300 ppm von $y=2$ bis 3.5 m und $x=1.2$ bis 1.9

m ausbilden. Am Rauchgasaustritt hat der Ammoniak-Massenanteil den Wert 125 ppm im Bereich von $x=1.1$ bis 2.4 m. Im Vergleich zur Berechnung ohne chemische Reaktionen (vgl. Abbildung 23) erfolgt eine deutliche Abnahme des Ammoniak-Massenanteils ab $y=3.5$ m. In Abbildung 48 ist der Ammoniak-Massenanteil in der Eindüsungsebene mit ablaufenden chemischen Reaktionen dargestellt.

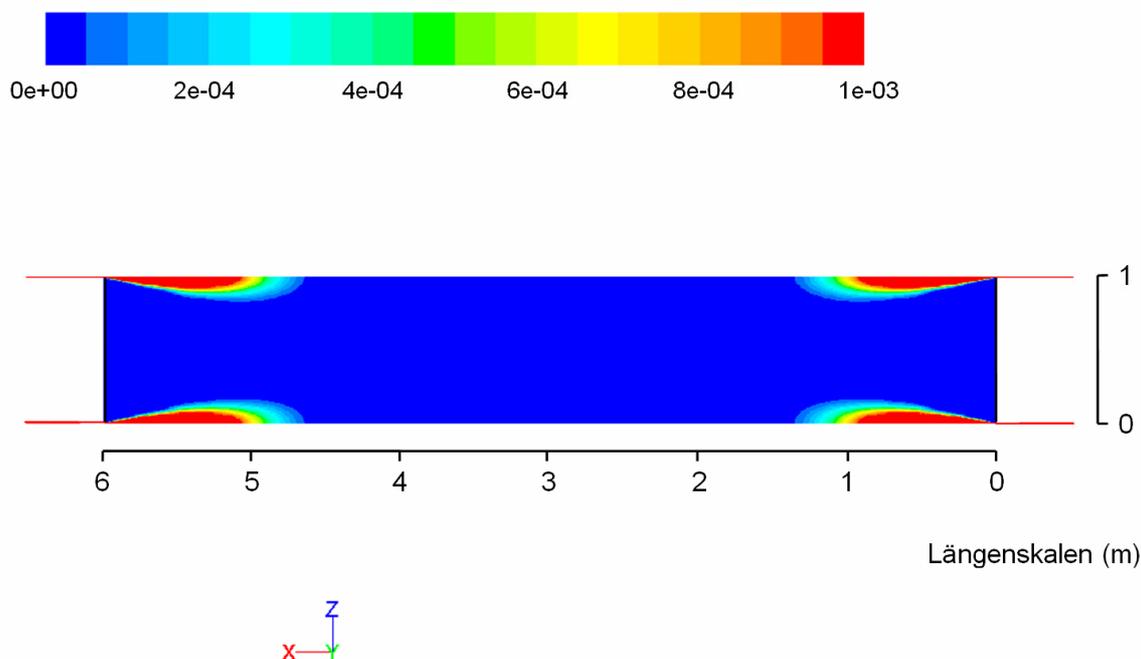


Abbildung 48: Profil des Ammoniak-Massenanteils im Horizontalschnitt in der Eindüsungsebene ($y=1$ m) mit chemischen Reaktionen.

Bereiche in der Eindüsungsebene ($y=1$ m), in der Ammoniak-Massenanteile über 1000 ppm liegen, reichen von Düsenaustritt strahlfolgend bis etwa 0.9 m Normalabstand hin zur Kesselwand. Ab einer Distanz von zirka 1.4 m normal zur Wandfläche ist de facto kein Ammoniak mehr mit den Rauchgasen vermischt. Die Ausbreitung des im eingedüsten Gemisch enthaltenen Ammoniaks in z-Richtung beläuft sich auf maximal 0.17 m oder etwa einem Drittel der Tiefe des Kesselsegments. Ein Vergleich des Ammoniak-Massenanteil-Profiles ohne ablaufende chemische Reaktionen (Abbildung 24) zeigt, dass in der Eindüsungsebene noch kein erkennbarer Verbrauch der Spezies Ammoniak, durch Stickstoffmonoxid-Reduktion und Ammoniak-Oxidation stattfindet. In Abbildung 49 ist das Profil des Ammoniak-Massenanteils am Rauchgasaustritt ersichtlich.

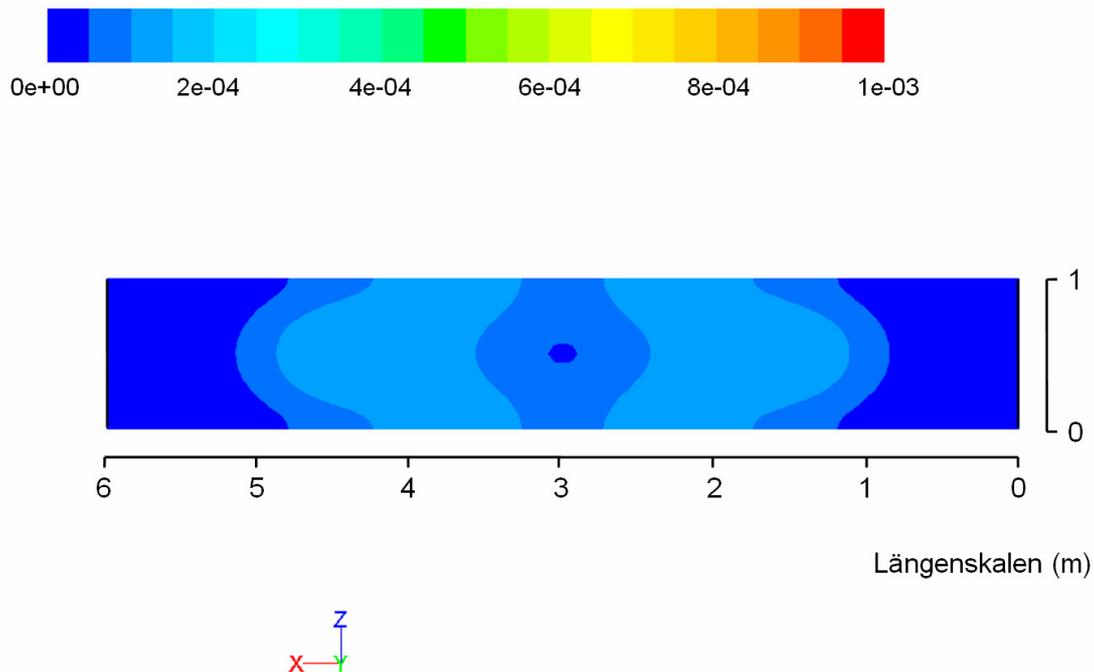


Abbildung 49: Profil des Ammoniak-Massenanteils am Rauchgasaustritt ($y=7$ m) mit chemischen Reaktionen.

Am Rauchgasaustritt – 6 m vertikal über der Eindüsungsstelle – liegen Gebiete mit maximalen Ammoniak-Massenanteilen von 125 ppm vor, dessen Flächen etwa ein Drittel des Kesselquerschnitts einnehmen. Bis zu einem Normalabstand zur Kesselwand von 0.8 m ist de facto kein Ammoniak in den Rauchgasen verteilt. Durch das Ablaufen der chemischen Reaktionen bei denen Ammoniak verbraucht wird, ergibt sich mit den definierten Randbedingungen ein mittlerer Ammoniak-Massenanteil von 84 ppm am Rauchgasaustritt. Im Vergleich dazu beträgt der mittlere Ammoniak-Massenanteil 155 ppm ohne stattfindende chemische Reaktionen (Abbildung 25).

7.5.4 Profile des Stickstoffmonoxid-Massenanteils

In den folgenden Abbildungen werden die Profile des Stickstoffmonoxid-Massenanteils am Rauchgasaustritt und im Vertikalschnitt in der Eindüsungsebene vorgelegt. So können Gebiete quantifizierbar gemacht werden, in denen hohe bzw. niedrige *NO*-Reduktion stattfindet. Das sich ausbildende Profil des Stickstoffmonoxid-Massenanteils am Rauchgasaustritt mit ablaufenden chemischen Reaktionen ist in Abbildung 50 dargestellt.

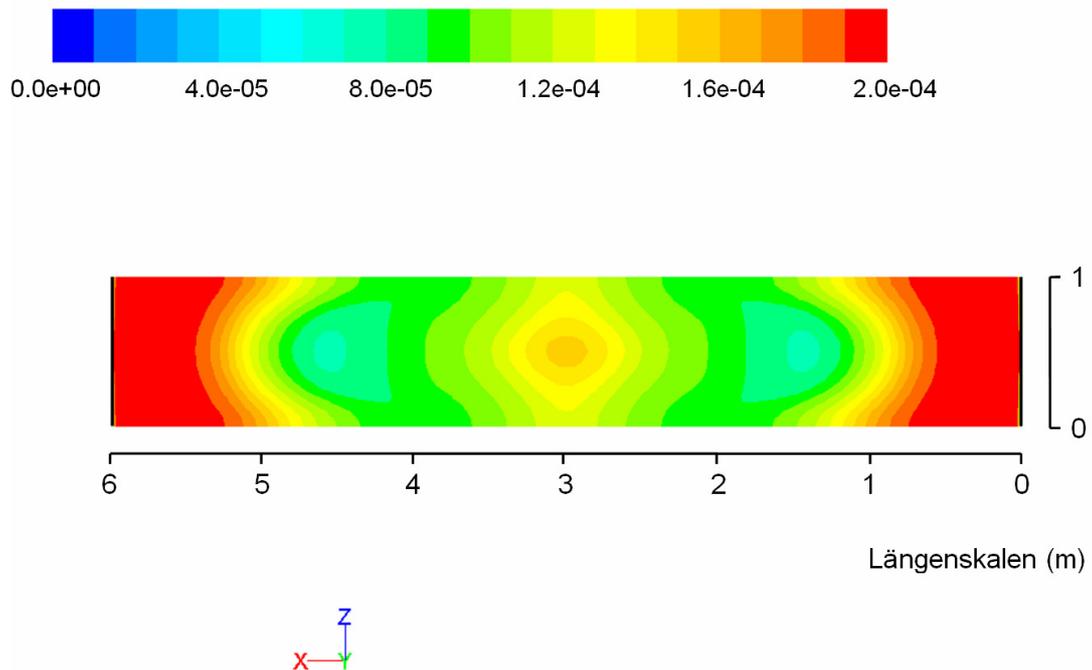


Abbildung 50: Profil des Stickstoffmonoxid-Massenanteils am Rauchgasaustritt ($y=7$ m) mit chemischen Reaktionen.

Das Gebiet der größten NO -Reduktion liegt im Abstand von 1.4 bis 1.6 m von den Wänden bei $z=0.4$ bis 0.5 m. In dieser Region verbleibt ein NO -Massenanteil von 85 ppm. Das entspricht einer NO -Reduktion von 58% in diesem Bereich. Bis zu einem Normalabstand von 0.6 m von den Wänden erfolgt keine Umsetzung des Stickstoffmonoxids. In der Mitte des Kessels, bei $x=3$ m liegt der NO -Massenanteil zwischen 125 ppm und 155 ppm. Der NO -Massenanteil am Rauchgaseintritt beträgt 200 ppm. In Abbildung 51 ist das Profil des Stickstoffmonoxid-Massenanteils in der Symmetrieebene im Vertikalschnitt durch die Düsen dargestellt.

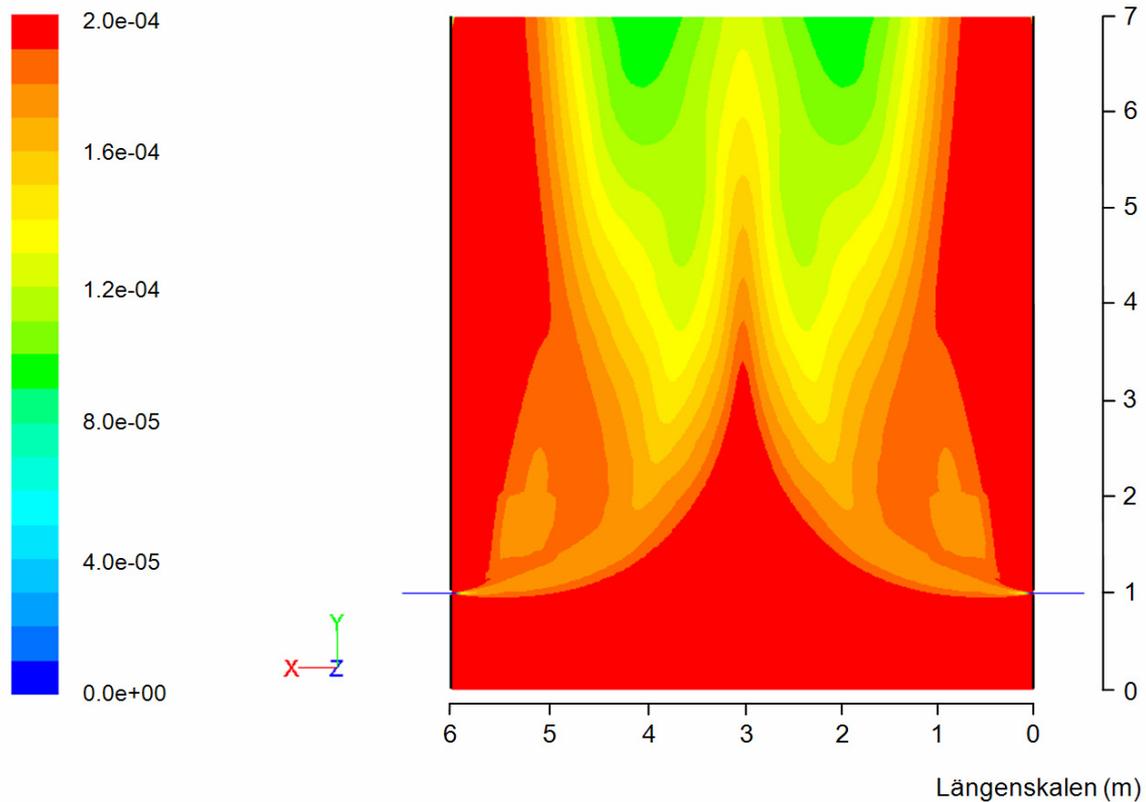


Abbildung 51: Profil des Stickstoffmonoxid-Massenanteils im Vertikalschnitt in der Symmetrieebene bei $z=0$ m mit chemischen Reaktionen.

Eine Reduktion des Stickstoffmonoxid-Massenanteils auf Werte unter 130 ppm findet erst ab einem Vertikalabstand von 2.5 m von der Eindüsungsstelle statt. Beginnend bei dieser Höhe erfolgt eine sichtbare Umsetzung der Stickoxide in der Kesselmitte bei $x=3$ m. Das Minimum des Stickstoffmonoxid-Massenanteils von 95 ppm liegt am Rauchgasaustritt in der Region von $x=1.6$ bis 2.5 m. Im Bereich um $x=0.5$ und $y=1.2$ m tritt ein Feld auf, dessen Stickstoffmonoxid-Massenanteil 10 ppm unter dem Wert der angrenzenden Umgebung liegt. Das Profil des Stickstoffmonoxid-Massenanteils ist in Abbildung 52 im Vertikalschnitt bei der Koordinate $z=0.5$ m dargestellt.

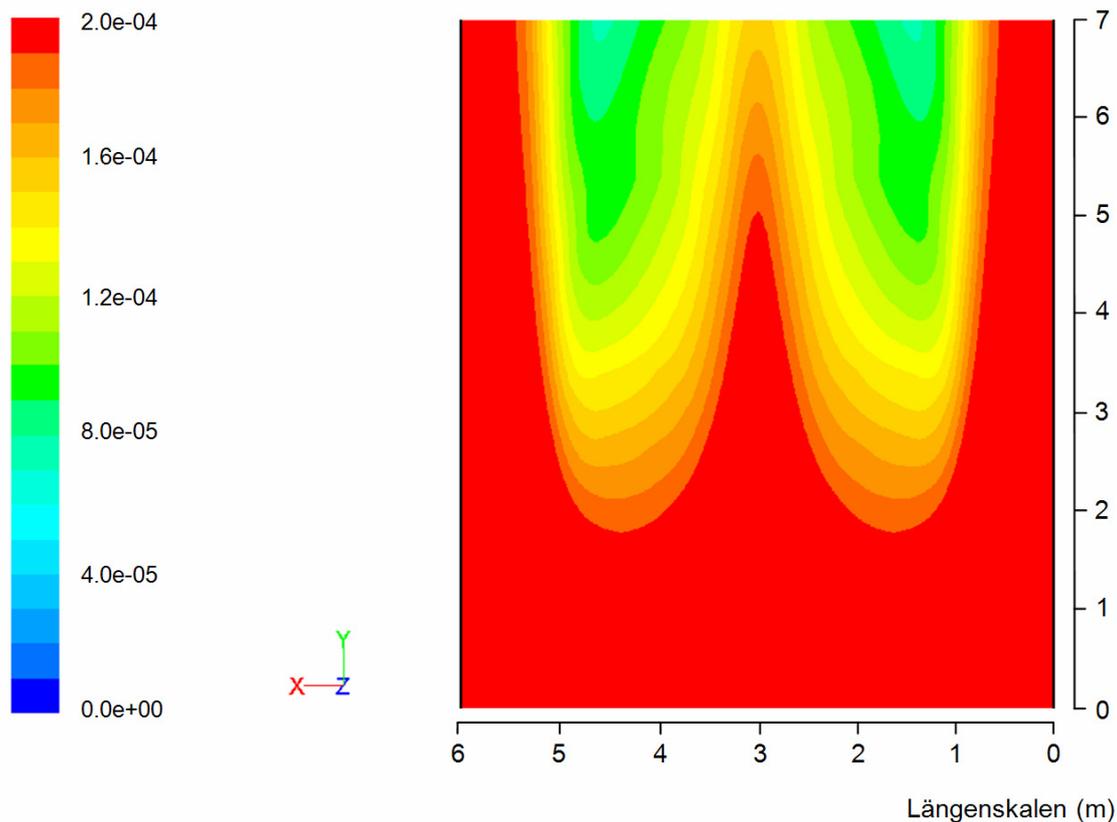


Abbildung 52: Profil des Stickstoffmonoxid-Massenanteils im Vertikalschnitt bei $z=0.5$ m mit chemischen Reaktionen.

Am Rauchgasaustritt ($y=7$ m) treten im Bereich von $x=1.2$ bis 1.8 m lokale Minima des Stickstoffmonoxid-Massenanteils von 85 ppm auf. Das entspricht einer NO -Reduktion von 58% in diesem Gebiet. Beginnend ab der Höhe $y=5$ m findet eine Umsetzung des Stickstoffmonoxids über die Kesselmitte hinweg statt. In dieser Höhe nimmt der Massenanteil des Stickoxids bis zu einem Wert von 95 ppm ab.

7.5.5 Temperaturprofile im Kessel

In diesem Abschnitt werden die berechneten Temperaturprofile des Kesselsegments im Rauchgasaustritt in Abbildung 53 und im Vertikalschnitt an der Stelle $z=0$ m in Abbildung 54 dargestellt.

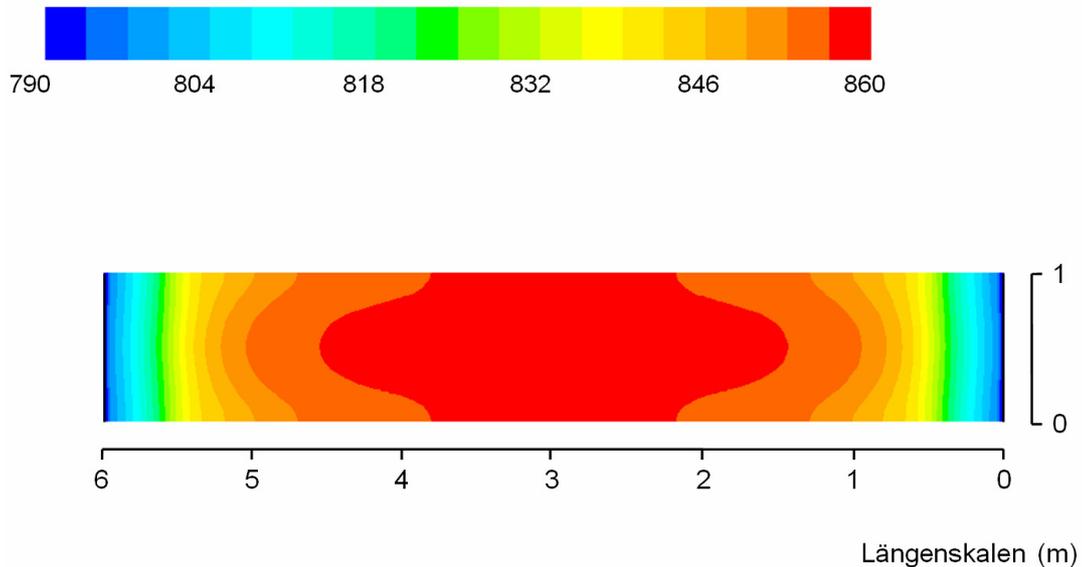


Abbildung 53: Temperaturprofil (°C) am Rauchgasaustritt ($y=7$ m).

Das Temperaturprofil am Rauchgasaustritt zeigt das im Kernbereich des Kessels liegende Temperaturmaximum von 860°C , dessen Gebiet über ein Drittel des Kesselquerschnitts einnimmt. Der Bereich, in dem die Temperatur unter 800°C liegt, befindet sich beginnend an der Wand bis zu einem Abstand von 0.1 m von der Wand. Im Abstand von 0.5 m von der Kesselwand beträgt die Temperatur im Mittel rund 834°C . Die flächengemittelte Temperatur am Rauchgasaustritt beträgt 848°C . Mit der Randbedingung am Rauchgaseintritt von 900°C , kühlen die Rauchgase im Mittel 52K beim Durchströmen des sieben Meter hohen Kessels ab. In Abbildung 54 ist das Temperaturprofil in der Symmetrieebene im Vertikalschnitt durch die Düsen dargestellt.

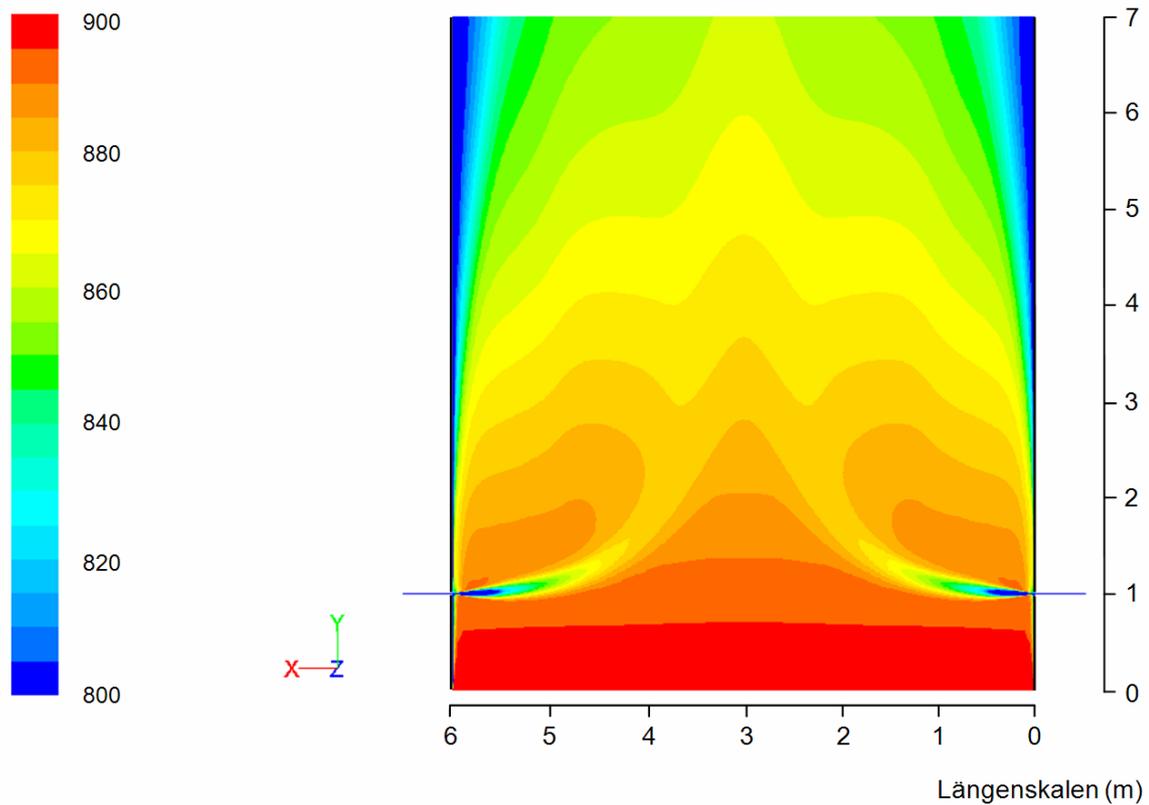


Abbildung 54: Temperaturprofil (°C) im Vertikalschnitt in der Symmetrieebene bei $z=0$ m.

Beim Eindüsenstrahl und nahe an der Wand treten Temperaturen unter 800°C auf, die im Temperaturprofil farblich mit dem niedrigsten Wert der Skala dargestellt sind. In allen horizontalen Ebenen treten die höchsten Temperaturen in der Kesselmitte bei $x=3$ m auf. Der Eindüsenstrahl des Wasserdampf-Ammoniak-Gemisches weist Temperaturen von unter 852°C in einem Gebiet vom Düsenaustritt bis 1 m in den Kesselraum hinein auf. Ab etwa der Höhe $y=3$ m tritt markant ein periodisches Temperaturprofil im Kessel auf, das dadurch hervorgerufen wird, dass der Eindüsenstrahl, der mit zunehmendem Abstand vom Düsenaustritt in Richtung Rauchgasaustritt abgelenkt wird, eine geringere Temperatur hat als das Rauchgas und dadurch zunächst eine Temperaturabnahme im Temperaturprofil erfolgt. Weiter stromabwärts des Strahls bewirkt die höhere Geschwindigkeit des Eindüsenstrahls gegenüber der Rauchgasströmung, die lokal kürzere Verweilzeiten der Teilchen nach sich zieht und geringeren Wärmetransport zulässt, eine Temperaturerhöhung im Profil. Die beiden ablaufenden chemischen Reaktionen des zweistufigen Mechanismus nach Duo et al. [15] – eine für die Stickstoffmonoxid-Reduktion und eine für die Ammoniak-Oxidation – sind exotherm und tragen zu einer Erhöhung der Temperatur bei, die jedoch von untergeordneter Bedeutung

ist. Die chemischen Reaktionen leisten in einem Kesselsegment eine Reaktionswärme von 2138 W.

7.5.6 Kesselwand

In diesem Abschnitt wird das Temperaturprofil an der Innenseite der Kesselwand zusammen mit der gesamten und der strahlungsbedingten Wärmestromdichte der Kesselwand behandelt. Um den Wert aus der CFD-Berechnung der gesamten Wärmestromdichte der Kesselwand festzumachen, wurde die Wärmeübergangszahl an der Innenwand der Literatur entnommen und mit den festgelegten Randbedingungen die gesamte Wärmestromdichte bereits in Abschnitt 5.3 abgeschätzt.

7.5.6.1 Temperaturprofil

Das Temperaturprofil der Wandinnenseite ist in Abbildung 55 anhand zweier Kesselsegmente abgebildet.

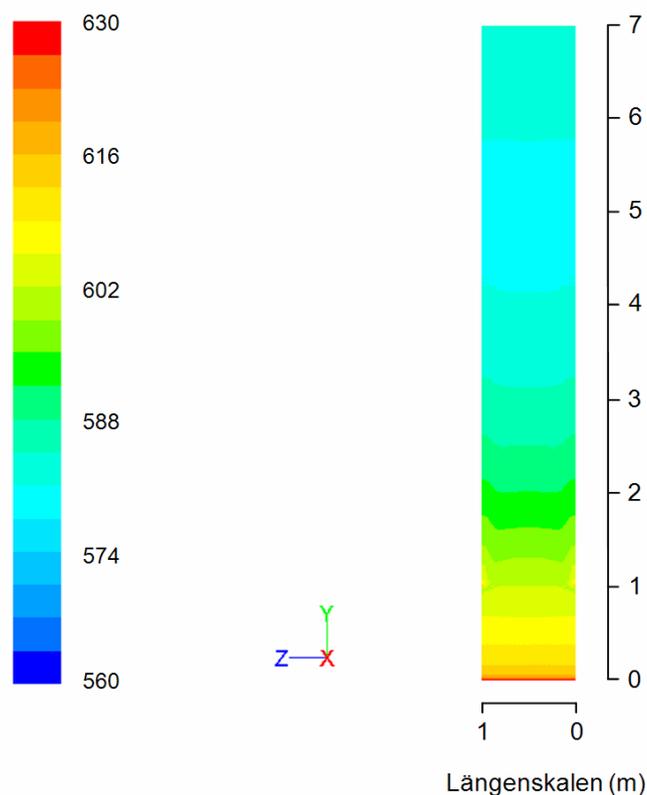


Abbildung 55: Temperaturprofil (°C) der Wandinnenseite zweier Kesselsegmente.

Die Temperatur an der Wandinnenseite nimmt von 630°C unmittelbar nach dem Rauchgaseintritt ($y=0$ m) auf 583°C am Rauchgasaustritt ($y=7$ m) ab. Die flächengemittelte Temperatur an der Kesselwand beträgt 589°C. Das Temperaturminimum von 579°C tritt von $y= 4.2$ bis 5.7 m auf. Mit zunehmender Höhe ab

$y=5.7$ m nimmt die Wandtemperatur wieder zu. Dies kann dadurch erklärt werden, dass die Temperatur der Rückströmungen, die an der Wand auftreten, zu hoch vorgegeben ist. Die Temperatur für Rückströmungen am Rauchgasaustritt muss zu Beginn der Simulation als Randbedingung vorgegeben werden, also zu einem Zeitpunkt, an dem noch keine Kenntnisse über die Wandtemperatur bzw. die Zonen mit Rückströmungen vorliegen.

7.5.6.2 Wärmestromdichte

In Abbildung 56 sind die Wärmestromdichten durch Strahlung und die gesamte Wärmestromdichte entlang der Kesselwand aufgetragen.

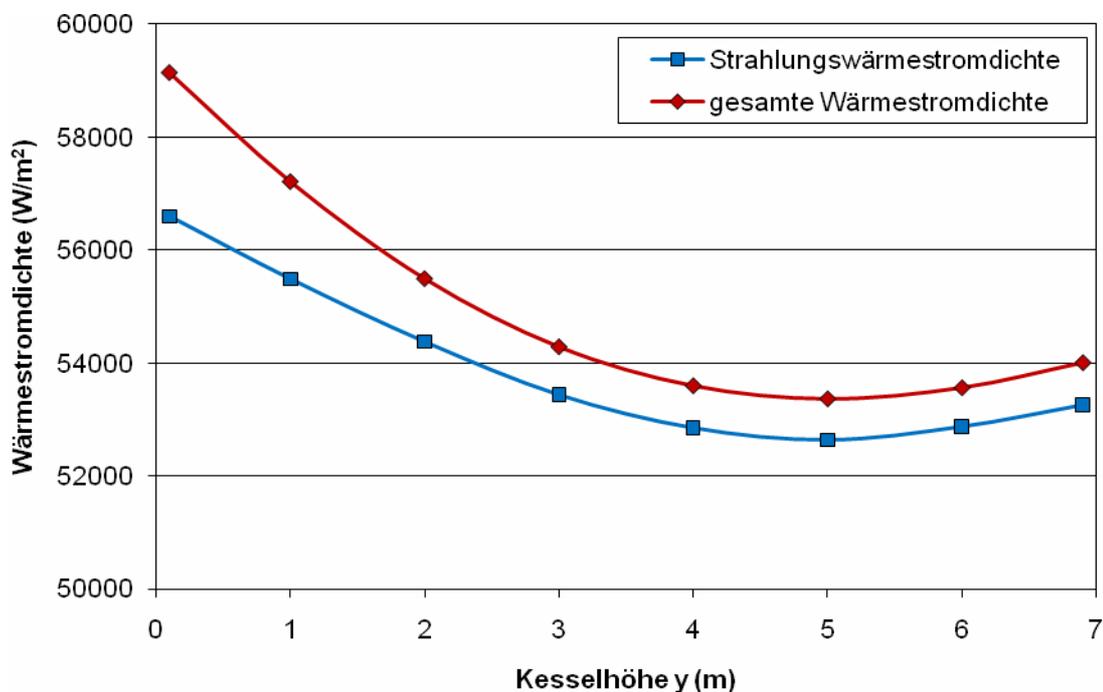


Abbildung 56: Profil der gesamten Wärmestromdichte q (W/m^2) und der Strahlungswärmestromdichte q_r (W/m^2) über die Kesselhöhe y (m).

Die abgebildeten Verläufe der Wärmestromdichten nehmen vom Rauchgaseintritt ($y=0$) bis zur Höhe $y=5$ m stetig ab und steigen im weiteren Verlauf wieder leicht an. Unmittelbar nach Rauchgaseintritt beträgt die gesamte Wärmestromdichte $59133 W/m^2$. Sie weist ein Minimum bei $y=5$ m von $53359 W/m^2$ auf und hat flächengemittelt über die Kesselwand den Wert $54789 W/m^2$. Das Ergebnis basiert auf einer Verschmutzungsschicht von 1.9 mm für die Berechnung des Wärmetransportwiderstands. Die flächengemittelte gesamte Wärmestromdichte ergibt multipliziert mit der Wandfläche einen Wärmestrom von 191.7 kW durch die Kes-

selwand eines Segments. Die Differenz zwischen aufgetragener gesamter und strahlungsbedingter Wärmestromdichte stellt den durch Leitung des Fluids an der Wand übertragenen Anteil dar, der mit zunehmender Durchströmung des Kessels bis zu $y=6$ m abnimmt und flächengemittelt 1041 W/m^2 beträgt. Im vorliegenden Berechnungsfall werden 98% der Wärmestromdichte strahlungsbedingt hervorgerufen.

Die Wärmedurchgangsberechnung im Fallbeispiel des Prospekts für Feuerfestabkleidungen für Müllheizkraftwerken und Biomasseverbrennungsanlagen [21], dessen Wandaufbau und Temperaturniveaus mit dem vorliegenden Fall vergleichbar sind, werden Wärmestromdichten von 103000 W/m^2 ohne Verschmutzung und 23800 W/m^2 mit 5 mm Verschmutzungsschicht angegeben. Das vorliegende Simulationsergebnis liegt innerhalb dieser weiten Grenzen, die auf die dominierende Rolle der Verschmutzung beim Wärmeübergang hinweisen. Das Simulationsergebnis liegt etwa 6% unter dem Wert für die gesamte Wärmestromdichte aus der Abschätzung in Abschnitt 5.3.

8 Zusammenfassung

Der Inhalt dieser Arbeit besteht in der Entwicklung einer Methodik für die CFD-Simulation des SNCR-Verfahrens. Ein wesentlicher Teil der Aufgabenstellung liegt darin, den Eindüsungsvorgang eines Gasstrahls in ein Kesselsegment – der Testgeometrie – durch ein CFD-Modell abzubilden. Dabei sollen Eindringtiefe und Verteilung des eingedüsten Wasserdampf-Ammoniak-Gemisches im Kesselsegment berechnet werden. Die Verteilung der eingedüsten Spezies Ammoniak, die als Maß für die Güte des SNCR-Verfahrens herangezogen werden kann, wird zunächst ohne chemische Reaktionen mit verschiedenen Düsenvordrücken berechnet. Die Untersuchungen zeigten, dass sich beim Eindüsungsvorgang ein unterexpandierter Freistrahler ausbildet, der im Mündungsquerschnitt der Düse Schallgeschwindigkeit erreicht, und anschließend in den ersten Strahlzellen auf Überschallgeschwindigkeit beschleunigt, da der Gegenruck im Kessel unter dem kritischen Druck im Mündungsquerschnitt liegt. Dadurch treten im Strömungsfeld lokal hohe Geschwindigkeits- und Druckgradienten auf, die es erforderten, mit dem Density-Based Solver des verwendeten Simulationsprogrammes zu arbeiten.

Die Beurteilung des Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes der Rauchgasströmung mittels dimensionsloser Kennzahlen, welche die Bedeutung von Auftriebs-, Trägheits- und Zähigkeitskräften, sowie der Schwerkraft erkennen lassen, zeigte, dass auch die Berücksichtigung des Massenkraftterms für eine korrekte Impulsbilanz wichtig ist. Weiter sind im vorliegenden Fall die Auftriebskräfte und die Trägheitskräfte von gleicher Größenordnung. Daher liegt gemischte Konvektion vor, die sich aus Anteilen freier und erzwungener Konvektion zusammensetzt.

Anfangs traten in den durchgeführten Simulationen erhebliche Konvergenzschwierigkeiten auf. Da auch seitens der betreuenden Firma wenig Erfahrung im Umgang mit dem Density-Based Solver vorlag, bestand ein Teil der Arbeit darin, geeignete Lösungsstrategien zu entwickeln. So wurde an einer einfachen Testgeometrie ein zweckmäßiges Rechennetz erstellt und geeignete Unterrelaxationsfaktoren gesucht, die zu einer stabilen Berechnung führten. Mit der erarbeiteten Methodik soll die Berechnung an realen Geometrien ermöglicht werden.

In einem weiteren Aufgabenpunkt wurden verschiedene Reaktionsmechanismen hinsichtlich ihrer Eignung zur Beschreibung des SNCR-Verfahrens an einer ver-

einfachten Geometrie untersucht. Dabei wurden nach durchgeführter Literaturrecherche ein empirischer zweistufiger, ein siebenstufiger und ein detaillierterer 31-stufiger Reaktionsmechanismus zur Stickoxidreduktion durch das Reduktionsmittel Ammoniak bzw. Harnstoff, ablaufend in Gasphasenreaktionen, bei mehreren Temperaturen in einem kreisrunden Rohrstück simuliert. Für die Beurteilung der Mechanismen wurden die Stickstoffmonoxid-Reduktion und der Ammoniak-Schlupf im Temperaturfenster von 850 bis 1050°C mit experimentellen Messwerten verglichen. Dabei wurde festgestellt, dass der auf empirischen Zusammenhängen basierende zweistufige Mechanismus für eine Reaktionszeit von einer Sekunde, trotz der geringsten Anzahl an Reaktionsgleichungen, gut mit experimentellen Messwerten korreliert.

In einem weiteren Schritt wurde die Durchströmung des Kesselsegments mit chemischen Reaktionen mit verschiedenen Rauchgaseintrittstemperaturen an der Testgeometrie untersucht. Dabei wurden die Stickstoffmonoxid-Reduktion sowie der Ammoniak-Schlupf in mehreren Vertikalabständen über der Eindüsungsebene berechnet und die Temperaturabnahme der Rauchgase während der Durchströmung der Testgeometrie ausgewertet. Die Ergebnisse, die mit den Randbedingungen 800, 900 und 1000°C Rauchgaseintrittstemperatur berechnet wurden, ergaben für 900°C die höchste Stickstoffmonoxid-Reduktion während der Durchströmung des Kesselsegments.

Um die Temperaturabnahme der Rauchgase abzubilden, wurde auch die Strahlung berechnet und eine konstante Kesselwandtemperatur mit definiertem Wärmetransportwiderstand als Randbedingung festgelegt. Hier hat sich gezeigt, dass der Strahlungsanteil mit 98%, den wesentlichen Beitrag an der Wärmeübertragung leistet. Mit der erarbeiteten Anleitung zur Erstellung eines CFD-Modells und zur Durchführung der Simulation, sowie mit den getesteten Reaktionsmechanismen, sollen in Zukunft CFD-Simulationen des SNCR-Verfahrens an realen Geometrien mit verschiedenen Betriebsparametern und Düsengeometrien durchgeführt und so wesentliche Beiträge zur Verfahrensoptimierung geleistet werden.

Literaturverzeichnis

- [1] Ablinger, S.: Kalibrierung und Verifikation von Siedemodellen für die 3D-Strömungssimulation. Diplomarbeit, AVL List GmbH und Institut für Strömungslehre und Wärmeübertragung, TU Graz; 2002.
- [2] Adamson, T. C.; Nicholls, J. A.: On the Structure of Jets from Highly Under-expanded Nozzles into Still Air. *Journal of the Aerospace Sciences*, Volume 26, Seiten 16-24; 1959.
- [3] Ansys, Inc.: Ansys Fluent 12.0 Theory Guide. Canonsburg, Pennsylvania; 2009.
- [4] Basara, B.: Numerische Methoden Strömungslehre und Wärmeübertragung. *Turbulence Modelling (2009/2010)*, Vorlesungsmanuskript, TU Graz; 2009.
- [5] Berchtold, M.: *Thermodynamik 2. Autographie*, ETH Zürich; 1973.
- [6] Blazek, J.: *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*. Elsevier, Amsterdam; 2001.
- [7] Bošnjaković, F.; Knoche, K.-F.: *Technische Thermodynamik 1*. VEB, Leipzig; 1988.
- [8] Brenn, G.: *Gasdynamik*. Vorlesungsmanuskript, TU Graz; 2008.
- [9] Brenn, G.: *Strömungslehre und Wärmeübertragung 1*. Vorlesungsmanuskript, TU Graz; 2008.
- [10] Brouwer, J.; Heap, M.P.; Pershing, D.W.; Smith, P.J.: A Model for Prediction of Selective Non-Catalytic Reduction of Nitrogen Oxides by Ammonia, Urea and Cyanuric Acid with Mixing Limitations in the Presence of CO. *Symposium (International) on Combustion*, Volume 26, Seiten 2117-2124; 1996.
- [11] Brunner, M.: *Das Von Roll SNCR-Verfahren – Konzept und Erfahrungen*. Von Roll AG, Zürich; 1995.
- [12] Dam-Johansen, K.; Ostberg, M.: Empirical Modeling of the Selective Non-Catalytic Reduction of NO: Comparison with Large-Scale Experiments and Detailed Kinetic Modeling. *Journal of Chemical Engineering Science*, Volume 49, Seiten 1897-1904; 1994.

- [13] Dean, A.M.; Hardy, J.E.; Lyon, R.K.: Kinetics and Mechanism of NH_3 Oxidation. Symposium (International) on Combustion, Volume 19, Seiten 97-105; 1982.
- [14] Dittrich, R.; Nowag, R.: Vergleichende Beurteilung und Abscheideleistung von SNCR-/SCR-Technik. VDI-Wissensforum: BAT- und preisorientierte Rauchgasreinigungstechniken, München; 2002.
- [15] Duo, W.; Dam-Johansen, K.; Ostergaard, K.: Kinetics of the Gas-Phase Reaction between Nitric Oxide, Ammonia and Oxygen. Canadian Journal of Chemical Engineering, Volume 70, Seiten 1014-1020; 1992.
- [16] Duo, W.; Dam-Johansen, K.; Ostergaard, K.: Widening the Temperature Range of the Thermal DeNO_x Process. An Experimental Investigation. Symposium (International) on Combustion, Volume 23, Seiten 297-303; 1991.
- [17] Eichlseder, H.: Thermodynamik. Vorlesungsmanuskript, TU Graz; 2009.
- [18] Gilli, P.: Thermische Stoffwerte. TU Graz; 1996.
- [19] Hinze, J. O.: Turbulence. McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering. New York; 1975.
- [20] Javed, M. T.; Irfan, N.; Gibbs, B. M.: Control of Combustion-Generated Nitrogen Oxides by Selective Non-Catalytic Reduction. Journal of Environmental Management, Volume 83, Seiten 251-289; 2007.
- [21] Jünger+Gräter GmbH: Feuerfestabkleidungen in Müllheizkraftwerken und Biomasseverbrennungsanlagen. Produktinformation *JuSyS*[®]SL; 2007.
- [22] Krause, E.: Gasdynamik. Vorlesungsmanuskript der RWTH Aachen; 1991.
- [23] Launder, B. E.; Spalding, D. B.: Lectures in Mathematical Models of Turbulence. Academic Press, London; 1972.
- [24] Lee, G.-W.; Shon, B.-H.; Yoo, J.-G.; Jung, J.-H.; Oh, K.-J.: The Influence of Mixing Between NH_3 and NO for a De-NO_x Reaction in the SNCR Process. Journal of Industrial and Engineering Chemistry, Volume 14, Seiten 457-467; 2008.
- [25] Love, E. S.; Grigsby, C. E.; Lee, L. P.; Woodling, M. J.: Experimental and Theoretical Studies of Axisymmetric Free Jets. NASA Technical Report R-6, Langley; 1959.
- [26] Lücke, J. R.: Turbulenzmodellierung zur Berechnung abgelöster Strömungen in Turbomaschinen. Shaker, Aachen; 1997.

- [27] Lyon, R. K.: Kinetics and Mechanism of Thermal DeNO_x: A Review, 194th American Chemical Society Meeting, Volume 32, Seite 433-443; 1987.
- [28] Man, H. C.: Dynamic Characteristics of Gas Jets from Subsonic and Supersonic Nozzles for High Pressure Gas Laser Cutting. *Journal of Optics & Laser Technology*, Volume 30, Seiten 497-509; 1998.
- [29] Martin, K.-U.; Metschke, J.: Keramische Rohrwandschutzsysteme im wirtschaftlichen Vergleich. VGB Fachtagung; 2006.
- [30] Merker, G. P.; Baumgarten, C.: Fluid- und Wärmetransport Strömungslehre. Teubner, Stuttgart; 2000.
- [31] Miller, J.-A.; Bowman, C.T.: Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion, *Journal of Progress in Energy and Combustion Science*, Volume 15, Seiten 287-338; 1989.
- [32] Nguyen, D.B.T.; Kang, T.-H.; Lim, Y.-I.; Eom, W.-H.; Kim, S.-J.; Yoo, K.-S.: Application of Urea-Based SNCR to a Municipal Incinerator: On-Site Test and CFD Simulation. *Chemical Engineering Journal*, Volume 152, Seiten 36-43; 2009.
- [33] Nguyen, D.B.T.; Lim, Y.-I.; Eom, W.-H.; Kim, S.-J.; Yoo, K.-S.: Experiment and CFD Simulation of Urea-Based Selective Non-Catalytic Reduction (SNCR) in a Pilot Scale Flow Reactor. *Journal of Energy & Fuels*, Volume 22, Seiten 3864-3876; 2008.
- [34] Obernberger, I.: Abbrand- und NO_x-Simulation für Biomassefeuerungen. *Berichte aus Energie- und Umweltforschung des BMVIT*, Schriftenreihe 31/2003; 2003.
- [35] Ohnewein, P.: Optimierung der Methodik zur CFD-Simulation von Abgasnachbehandlungssystemen mit FIRE 8. Diplomarbeit, AVL List GmbH und Institut für Mathematik C, TU Graz; 2004.
- [36] Ostberg, M.; Dam-Johansen, K.; Johnsson, J. E.: Influence of Mixing on the SNCR Process. *Journal of Chemical Engineering Science*, Volume 52, Seiten 2511-2525; 1997.
- [37] Posch, M. O.: Numerische Untersuchung der Zweiphasenströmung in einem Gutaufgabeinjektor. Dissertation, Institut für Thermodynamik und Energiewandlung, TU Wien; 2006.
- [38] Rist, D.: Dynamik realer Gase. Springer, Berlin; 1996.

-
- [39] Roe, P. L.: Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes. *Journal of Computational Physics*, Volume 43, Seiten 357-372; 1981.
- [40] Roe, P. L.: Characteristic Based Schemes for the Euler Equations. *Journal of Annual Review of Fluid Mechanics*, Volume 18, Seiten 337-365; 1986.
- [41] Sanz, W.: *Computational Fluid Dynamics*. Vorlesungsmanuskript, TU Graz; 2008.
- [42] Schlichting, H.; Gersten, K.: *Grenzschicht-Theorie*. Springer, Berlin; 2006.
- [43] Shih, T.-H.; Liou, W. W.; Shabbir, A.; Yang, Z.; Zhu. J.: A New k - ϵ Eddy-Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows – Model Development and Validation. *Journal of Computers & Fluids*, Volume 24, Seiten 227-238; 1995.
- [44] Steiner, H.: *Höhere Strömungslehre und Wärmeübertragung*. Vorlesungsmanuskript, TU Graz; 2008.
- [45] Steiner, H.: *Numerische Methoden Strömungslehre und Wärmeübertragung*. Vorlesungsmanuskript, TU Graz, 2009.
- [46] Thomé-Kozmiensky, K. J.; Beckmann, M.: *Energie aus Abfall*. TK, Neuruppin; 2008.
- [47] Thomé-Kozmiensky, K. J.; Beckmann, M.: *Optimierung der Abfallverbrennung 2*. TK, Neuruppin; 2005.
- [48] Traupel, W.: *Thermische Turbomaschinen*. Springer, Berlin; 1966.
- [49] Wilcox, D. C.: *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, La Canada, California; 1998.