



Institut für Thermische Turbomaschinen  
und Maschinendynamik



# Auslegung und Konstruktion eines Prüfstands zur katalytischen Umsetzung von Wasserstoff

Kurt Eckerstorfer

## Masterarbeit

Technische Universität Graz

Institut für Thermische Turbomaschinen und Maschinendynamik

Institutsvorstand: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Franz Heitmeir

Betreuer: Dr.-Ing. Oliver Borm

Graz , August 2015

## Statutory Declaration

I declare that I have authored this thesis independently, that I have not used other than the declared sources/resources, and that I have explicitly marked all material which has been quoted either literally or by content from the used sources.

Graz, \_\_\_\_\_

Date

\_\_\_\_\_  
Signature

## Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Graz, am \_\_\_\_\_

Datum

\_\_\_\_\_  
Unterschrift

# Vorwort

Die vorliegende Masterarbeit ist Teil des Förderprogramms "Take Off" (Fördernr. D1319000031) der österreichischen Forschungsförderungsgesellschaft FFG und wurde in Zusammenarbeit mit dem Institut für Thermische Turbomaschinen und Maschinendynamik der Technischen Universität Graz und der Projektpartnerfirma SES-Tec erstellt.

Folgenden Personen möchte ich für die Ermöglichung dieser Arbeit sowie für die gute Zusammenarbeit danken:

Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. Franz Heitmeir für die Durchsicht und Beurteilung der Arbeit

Herrn Dr.-Ing. Oliver Borm für die intensive Betreuung und kompetente Unterstützung bei der Lösung diverser Problemstellungen im Verlauf der Diplomarbeit.

Herrn Dr. Dalibor Jajcevic und Herrn Fabian Rasinger von der Partnerfirma SES-Tec, die jederzeit für Rückfragen zur Verfügung standen.

Abschließend möchte ich noch meinen Eltern, Leopold und Franziska, meiner Freundin Nicole und meinem besten Freund Julian einen ganz besonderen Dank für Ihre Unterstützung auf meinem gesamten Lebensweg, im Verlauf des Studiums und während der Diplomarbeit aussprechen.

# Kurzfassung

Die vorliegende Masterarbeit behandelt die Auslegung und Konstruktion einer katalytischen Brennkammer zur schadstoffarmen Verbrennung von Wasserstoff. Im Rahmen einer Forschungsarbeit am Institut für thermische Turbomaschinen und Maschinendynamik soll das Verhalten verschiedener Katalysatoren bei unterschiedlichen Betriebsbedingungen untersucht werden.

Um ein entsprechendes Gesamtkonzept erarbeiten zu können, sollten im ersten Schritt geeignete Katalysatoren ausgewählt werden. Als Entscheidungshilfen wurden dazu Informationen aus der einschlägigen Literatur, ein Simulationsprogramm und die Angaben der Firma Heraeus, die mit der Fertigung der Katalysatoren beauftragt wurde, herangezogen. Da für die nachfolgenden Experimente ein möglichst homogenes Brennstoff-Luft-Gemisch für den Katalysator zur Verfügung stehen soll, wurden im nächsten Schritt zwei unterschiedliche Geometrien mittels CFD-Simulation numerisch untersucht. Dabei wurde das Mischungs- und Strömungsverhalten mehrerer Drallerzeuger- sowie Micro-Mixer-Konfigurationen ausgewertet. Mit dem Micro-Mixer konnten dabei die besten Ergebnisse erzielt werden und somit wurde dieser in die abschließende Konstruktion der katalytischen Brennkammer eingearbeitet. Das Brennkammerkonzept wurde dahingehend ausgelegt, dass die bereits vorhandenen Versorgungs-, Mess- und Regeleinheiten im Verbrennungslabor zur Durchführung der Experimente genutzt werden können. Mit der erarbeiteten Konfiguration sind des Weiteren Experimente bei verschiedenen Betriebspunkten, sowohl bei mageren als auch bei fetten Verbrennungsluftverhältnissen, und Drücken bis zu 20 bar möglich. Im Rahmen der Neukonstruktion der katalytischen Brennkammer wurde zusätzlich das Grundgerüst des Prüfstands umkonstruiert.



# Abstract

This master thesis deals with the design and construction of a catalytic combustion chamber for low-emission combustion of hydrogen. It is part of a research project at the institute for thermal turbo machinery and machine dynamics. In this project the behaviour of various catalysts should be tested under different operating conditions.

In the first step of the thesis suitable catalysts for the experiments were selected. To choose relevant catalysts information from the literature, a simulation program and data of the catalyst producer Fa. Heraeus were used as decision support. To realize the experiments a homogenous fuel-air-mixture is necessary. Therefore two different geometries, a swirler and a micro-mixer, were numerical investigated with CFD simulations. The mixing and flow behaviour of several swirler and micro-mixer configurations were evaluated. The best results could be reached by the micro-mixers. Thus, this geometry was incorporated in the final combustion chamber design. Further, all in the laboratory existing and for the test necessary supply, measuring and control units can be connected to the catalytic combustion chamber. With the final construction is it possible to do experiments at pressure up to 20 bar under fuel-lean and fuel-rich conditions. As a part of the design of the catalytic combustion chamber, also the basic foundation of the test stand was redesigned.

# Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	viii
Tabellenverzeichnis	x
Nomenklatur	xi
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Motivation und Problemstellung	1
1.2 Aufgabenstellung und Ziele	3
<b>2 Einführende Literatur</b>	<b>4</b>
2.1 Stickoxidbildung bei der Verbrennung	4
2.2 Wasserstoff als Brennstoff	5
2.3 Katalytische Verbrennung	7
2.3.1 Funktionsweise Katalysator	7
2.3.1.1 $\text{NO}_x$ -Reduktion	9
2.3.1.2 Wandtemperatur	9
2.3.2 Katalysatorstruktur	11
2.3.2.1 Katalysatorträger (Substrat)	12
2.3.2.2 Washcoat	13
2.3.2.3 Reaktives Material	14
2.3.3 Anwendungsvarianten	16
2.3.3.1 Totale Umsetzung	17
2.3.3.2 Gestufte Umsetzung	18
<b>3 Auswahl geeigneter Katalysatoren</b>	<b>20</b>
3.1 Details aus Experimenten	20
3.2 Simulationsprogramm für die katalytische Verbrennung	22
3.2.1 Schematischer Aufbau	22
3.2.2 Berechnungsablauf des Simulationsprogramms	23
3.2.3 Resultate Modell 1	31
3.2.4 Validierung mit anderen Programmen	40
3.2.4.1 Modell 2	40
3.2.4.2 Modell 3	40
3.2.4.3 Resultate der Validierung	41
3.2.5 Fazit	43
3.3 Informationen und Lieferprogramm des Katalysatorherstellers	43
3.4 Gewählte Katalysatoren	45
<b>4 Auslegung und Simulation des Mischers</b>	<b>47</b>
4.1 Drallerzeuger	48
4.1.1 Drallerzeugergeometrien für die Simulation	49
4.2 Micro-Mixer	51
4.2.1 Micro-Mixer-Geometrien für die Simulation	51
4.3 Abschätzung der Strömungsbedingungen	54
4.4 Details zur Simulation	56
4.4.1 Parameter für die Auswertung	57
4.5 Resultate der Drallerzeugersimulation	59
4.5.1 Fazit	64
4.6 Resultate der Micro-Mixer-Simulation	64
4.6.1 Strömungsverhalten im Micro-Mixer	65
4.6.2 Position der porösen Zone	68

---

4.6.3	Homogenität der Mischung . . . . .	69
4.6.4	Axiales Strömungsprofil . . . . .	76
4.6.5	Massenströme der Wasserstoffinjektion . . . . .	78
4.6.6	Fazit . . . . .	83
4.7	Gewählte Konfigurationen . . . . .	84
<b>5</b>	<b>Konstruktion des Prüfstandes</b>	<b>85</b>
5.1	Anforderungen an den Prüfstand . . . . .	85
5.2	Die katalytische Brennkammer . . . . .	87
5.2.1	Funktionsweise und Aufbau . . . . .	88
5.2.1.1	Vorspannflansch . . . . .	90
5.2.1.2	Micro-Mixer . . . . .	90
5.2.1.3	Katalysatorhalterung, Mischrohr . . . . .	91
5.2.1.4	Dichtung . . . . .	92
5.2.1.5	Halterung . . . . .	93
5.2.1.6	Federpaket . . . . .	95
5.2.1.7	Sondenflansch . . . . .	96
5.2.1.8	Druckmantel . . . . .	97
5.2.1.9	Liner . . . . .	97
5.2.1.10	Zünderinrichtung . . . . .	98
5.2.2	Wechseln der Katalysatoren . . . . .	98
5.2.3	Strömungsverhalten in der Brennkammer . . . . .	99
5.3	Unterbau des Prüfstandes . . . . .	102
5.3.1	Grundgerüst . . . . .	103
5.3.2	Schlitten . . . . .	104
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>107</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>109</b>
<b>A</b>	<b>Garlock Spiraldichtung</b>	<b>111</b>

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Kostenvergleich verschiedener $NO_x$ -Kontrolltechnologien bei 25 und 5 ppm $NO_x$ [3]	2
2.1	Adiabate Flammtemperatur von Wasserstoff (Cantera) . . . . .	6
2.2	Aktivierungsenergie[6] . . . . .	8
2.3	Heterogene Reaktion der Wasserstoff-Oxidation (schematisch)[10] . . . . .	8
2.4	$NO_x$ -Konzentration in Abhängigkeit der Verbrennungstemperatur, Gegenüberstellung von magerer Vormischverbrennung und katalytischer Verbrennung[11] . . . . .	9
2.5	Temperaturverläufe in einem Katalysator in Abhängigkeit der $Le$ -Zahl (nach [9])	11
2.6	Aufbau eines Katalysators[13] . . . . .	11
2.7	Mikroskopische Schnittaufnahme eines Katalysators[8] . . . . .	12
2.8	Metallischer und keramischer Katalysatorträger[14] . . . . .	13
2.9	Oberflächengröße diverser Washcoats in Abhängigkeit der Temperatur nach einer 10-stündigen Erhitzung in Luft[3] . . . . .	14
2.10	Katalysatoraktivität bei der Umsetzung von Methan unter mageren und fetten Bedingungen[16] . . . . .	15
2.11	Katalysatoraktivität bei der Umsetzung von Methan unter mageren Bedingungen[16]	16
2.12	Schematische Darstellung einer 2-stufigen (Partial Conversion) und einer 1-stufigen (Total Conversion) katalytischen Brennkammer[8] . . . . .	17
2.13	Inverses Konzept unter mageren Bedingungen (i-CST)[19] . . . . .	18
2.14	Katalytische Verbrennung unter mageren Bedingungen (CST)[19] . . . . .	19
2.15	Katalytische Verbrennung unter fetten Bedingungen[19] . . . . .	19
3.1	Schematischer Aufbau des Reaktornetzwerks . . . . .	23
3.2	Temperaturverläufe bei konstanter Katalysatorlänge (10 cm) . . . . .	33
3.3	Temperaturverläufe bei konstanter Strömungsgeschwindigkeit (27,8 m/s) . . . . .	34
3.4	Temperaturverläufe bei konstanter Raumgeschwindigkeit ( $10^6$ l/h) . . . . .	34
3.5	H <sub>2</sub> -Molenbruch bei konstanter Katalysatorlänge (10 cm) . . . . .	35
3.6	H <sub>2</sub> -Molenbruch bei konstanter Strömungsgeschwindigkeit (27,8 m/s) . . . . .	35
3.7	H <sub>2</sub> -Molenbruch bei konstanter Raumgeschwindigkeit ( $10^6$ l/h) . . . . .	36
3.8	Temperaturverläufe bei konstanter Katalysatorlänge (10 cm) . . . . .	37
3.9	Umgesetzte Wärmemenge bei konstanter Katalysatorlänge (10 cm) . . . . .	38
3.10	Erreichung der max. Temperatur von 900 °C in Abhängigkeit der Strömungsgeschwindigkeit . . . . .	38
3.11	Wasserstoff-, Sauerstoff- und Wasserdampfmolenbrüche im Gasgemisch bei $v = 27,8$ m/s . . . . .	39
3.12	Spezieszusammensetzung an der Katalysatoroberfläche bei $v = 27,8$ m/s . . . . .	39
3.13	Temperatur und Druck der verschiedenen Modelle . . . . .	42
3.14	Wasserstoffverbrauch und Wasserproduktion der verschiedenen Modelle . . . . .	42
3.15	Reaktorvolumen und Massenströme der verschiedenen Modelle . . . . .	42
4.1	Strömungsfeld Drallerzeuger[2] . . . . .	48
4.2	Abmessungen Drallerzeuger . . . . .	49
4.3	Geometrie für die Drallerzeuger-Simulation . . . . .	50
4.4	Micro-Mixer 19-2-4-05-c . . . . .	52
4.5	Geometrie für die Micro-Mixer-Simulation . . . . .	53
4.6	Geschwindigkeiten im Micro-Mixer bei $\lambda = 3,0$ . . . . .	55
4.7	Geschwindigkeiten im Micro-Mixer bei $\lambda = 0,33$ . . . . .	56

4.8	$\lambda$ an verschiedenen Positionen in Strömungsrichtung für 50° Drallerzeuger . . . . .	59
4.9	Geschwindigkeitsverteilung für 50° Drallerzeuger . . . . .	60
4.10	Druckverteilung für 50° Drallerzeuger . . . . .	60
4.11	Axiales Geschwindigkeitsprofil für 50° Drallerzeuger . . . . .	61
4.12	Axiales Geschwindigkeitsprofil für die verschiedenen Drallerzeugergeometrien und einen Micro-Mixer . . . . .	63
4.13	Geschwindigkeitsverteilung im Micro-Mixer bei BP 1 . . . . .	65
4.14	Geschwindigkeitsverteilung im Micro-Mixer bei BP 4 und BP 5 . . . . .	66
4.15	Wasserstoffmassenverteilung im Micro-Mixer . . . . .	66
4.16	Druckverteilung im Micro-Mixer . . . . .	67
4.17	Verbrennungsluftverhältnis bei Betriebspunkt 1 . . . . .	70
4.18	Verbrennungsluftverhältnis bei Betriebspunkt 2 . . . . .	71
4.19	Verbrennungsluftverhältnis bei Betriebspunkt 3 und 4 . . . . .	73
4.20	Verbrennungsluftverhältnis bei Betriebspunkt 5 . . . . .	74
4.21	Axiale Geschwindigkeitsprofile bei BP 1 und 3 . . . . .	77
4.22	Axiale Geschwindigkeitsprofile bei BP 4 und 5 . . . . .	78
4.23	Aufteilung der $H_2$ -Injektionslöcher . . . . .	79
4.24	Abweichung der $H_2$ -Massenströme bei BP 1-3 und einem Injektionslochdurchmesser von 0,5 mm . . . . .	80
4.25	Abweichung der $H_2$ -Massenströme bei BP 1 und einem Injektionslochdurchmesser von 1,0 mm . . . . .	81
4.26	Abweichung der $H_2$ -Massenströme pro Düse bei einem Injektionslochdurchmesser von 0,5 mm und 1,0 mm . . . . .	82
4.27	Abweichung der $H_2$ -Massenströme, Überversorgung der äußeren bzw. Unterversorgung der inneren Löcher . . . . .	82
5.1	Katalytische Brennkammer . . . . .	87
5.2	Schnittdarstellung der katalytischen Brennkammer . . . . .	89
5.3	Vorspannflansch . . . . .	90
5.4	Micro-Mixer mit Anschlüssen . . . . .	91
5.5	Katalysatorhalterung . . . . .	92
5.6	Halterung . . . . .	94
5.7	Abmessung und Kennlinie der Federpakete . . . . .	95
5.8	Sondenflansch . . . . .	96
5.9	Druckmantel . . . . .	97
5.10	Zündeinheit . . . . .	98
5.11	Wechsel der Katalysatoren . . . . .	99
5.12	Berechnungspunkte . . . . .	100
5.13	Gesamtaufbau des Prüfstands . . . . .	102
5.14	Funktionsprinzip der zwei Schienenebenen . . . . .	103
5.15	Detaildarstellung des Schienepakets . . . . .	104
5.16	Schlitten und Aufbauten für die katalytische Brennkammer . . . . .	105
5.17	Gesamtaufbau im Verbrennungslabor . . . . .	106
A.1	Garlock Spiraldichtung . . . . .	111

# Tabellenverzeichnis

2.1	Eigenschaften des Wasserstoffs[5]	6
3.1	Experimentparameter Griffin[20]	21
3.2	Experimentparameter Ozawa[21]	21
3.3	Eingabeparameter für das Berechnungsprogramm	24
3.4	Variable Eingabeparameter	32
3.5	Konstante Eingabeparameter für das Berechnungsprogramm	32
3.6	Geänderte konstante Eingabeparameter für das Berechnungsprogramm	36
3.7	Katalysatormaterialien der Firma Heraeus	44
3.8	Katalysatorträger der Firma Heraeus	44
3.9	Liste der gewählten Katalysatoren	45
4.1	Varianten für die Drallerzeugersimulation	50
4.2	Varianten für die Micro-Mixer-Simulation	53
4.3	Betriebspunkte für die Simulation	54
4.4	Parameter und Positionen für die Auswertung der Simulationen	57
4.5	Uniformity Index für die verschiedenen Drallerzeugergeometrien und einem Micro-Mixer	62
4.6	Drallzahl und Druckverlust für die verschiedenen Drallerzeugergeometrien und einen Micro-Mixer	62
4.7	Flächengewichteter Uniformity Index bei verschiedenen Positionen der porösen Zone	68
4.8	Massengewichteter Uniformity Index bei verschiedenen Positionen der porösen Zone	69
4.9	Uniformity Indizes für alle Betriebspunkte und verschiedene Micro-Mixer-Varianten	75
5.1	Anwendungsvarianten für die Experimente	85
5.2	Geplante Messgrößen für den Versuchsaufbau	86
5.3	Komponenten des gesamten Prüfstandaufbaus	86
5.4	Eigenschaften der Spiraldichtung	93
5.5	Sicherheit gegen plastische Verformung	94
5.6	Strömungsverhalten in der Brennkammer	101

# Nomenklatur

## Abkürzungen

$Al_2O_3$	Aluminiumoxid
$CO_2$	Kohlenstoffdioxid
CST	Catalytically Stabilized Thermal combustion
$H_2O$	Wasser
$H_2$	Wasserstoff
$NO_x$	Stickoxide
$O_2$	Sauerstoff
$Pd$	Palladium
$Pt$	Platin
$Rh$	Rhodium

## Dimensionslose Kennzahlen

$Le$	Lewiszahl
------	-----------

## Hoch- und tiefgestellte Indizes

1	Zustand vor dem Verdichter
2	Zustand nach dem Verdichter/ vor dem Katalysator
$a$	flächengewichtet
$ad$	adiabat
$ax$	axiale Richtung
$\beta$	Strömungszustand
$B$	Brennstoff
$G$	Gas
$h$	Vorwärtsreaktion
$i$	Elementindex
$k$	Komponentenindex
$Kat$	Katalysator
$m$	massengewichtet
$\varphi$	Umfangsrichtung
$R$	Reaktor
$r$	Rückreaktion
$W$	Wand
$Zelle$	Katalysatorzelle

**Physikalische Größen**

$\alpha$	Wärmeausdehnungskoeffizient
$A$	Fläche
$a$	Temperaturleitfähigkeit
$A, B, C, D$	Komponenten
$c$	Geschwindigkeit
$c_p, c_v$	spezifische Wärmekapazität
$cpsi$	Cells per square inch
$cpsm$	Cells per square meter
$-\Delta H$	Reaktionsenthalpie
$\Delta$	Differenz
$D$	Diffusionskoeffizient
$d$	Durchmesser
$De$	Deckungsgrad
$\eta$	Wirkungsgrad
$E_a$	Aktivierungsenergie
$\gamma$	Uniformity Index
$\kappa$	Isentropenexponent
$k$	Proportionalitätsfaktor
$\lambda$	Verbrennungsluftverhältnis
$\lambda$	Wärmeleitfähigkeit
$l$	Länge
$\dot{m}$	Massenstrom
$n$	bestimmte Anzahl
$OFA$	Open Frontal Area
$\Pi$	Druckverhältnis
$p$	Druck
$\rho$	Dichte
$R, r$	Radius
$S_N$	Drallzahl
$T$	Temperatur
$u, v$	Geschwindigkeit
$\dot{V}$	Volumenstrom
$\vec{v}_i$	Geschwindigkeitsvektor
$V$	Volumen
$X$	Molenbruch
$Y$	Massenbruch



# Kapitel 1

## Einleitung

Der derzeitige Energiebedarf wird in etwa zu 90 % durch Verbrennungsprozesse gedeckt und eine Änderung dieser Situation ist vorerst nicht absehbar. Daher ist es notwendig, um eine zunehmende Belastung der Umwelt zu verhindern, vor allem an einer Reduktion des Schadstoffausstoßes zu arbeiten[1]. Hersteller für Gas-Turbinen, Motoren und Brennern werden dadurch laufend vor neue Herausforderungen gestellt. Fortschrittliche Brennkammer- und Abgasnachbehandlungstechnologien müssen entwickelt bzw. optimiert werden, um den zukünftig geforderten Grenzwerten zu entsprechen.

Eine dieser innovativen Technologien, welche vor allem zur Reduktion von Stickoxiden ( $NO_x$ ) verwendet wird, ist die katalytische Verbrennung. Sie kann im Bereich von Gasturbinen angewendet werden und zählt zu den primären Abgasentstickungstechnologien. Durch die Verwendung eines Katalysators kann ein Brennstoff-Luft-Gemisch, im Vergleich zur Gasphasenreaktion, bei einem sehr geringen Verbrennungsluftverhältnis stabil verbrannt werden. Die daraus resultierende, wesentlich geringere, Verbrennungstemperatur, führt zu einer deutlichen Reduktion des thermischen  $NO_x$ [2].

### 1.1 Motivation und Problemstellung

Bei der katalytischen Verbrennung sind Stickoxidwerte im Bereich von 1–5 ppm möglich. Im Vergleich dazu können bei anderen  $NO_x$ -Kontrolltechnologien, wie magere Vormischverbrennung (LPM), Wasser- oder Dampfeinspritzung (WDI) oder die selektive katalytische Reduktion (SCR), die  $NO_x$ -Emissionen lediglich auf etwa 25 ppm gesenkt werden. Zudem sind auch die Gesamtkosten (Anschaffungs- und Betriebskosten) bezogen auf den Energieausstoß in Megawatt (\$/MW) über eine Periode von 15 Jahren für die katalytische Verbrennung vergleichsweise niedrig[3] (siehe *Abb. 1.1*).

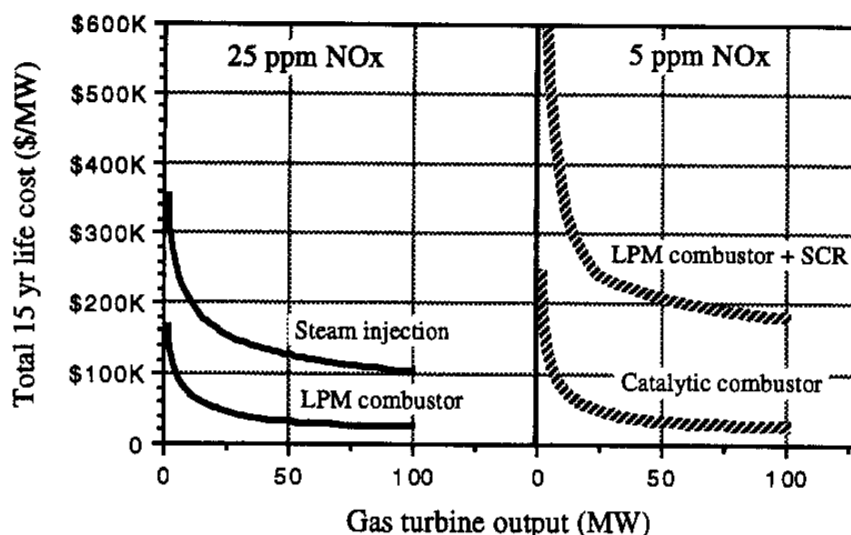


Abbildung 1.1: Kostenvergleich verschiedener  $NO_x$ -Kontrolltechnologien bei 25 und 5 ppm  $NO_x$ [3]

Im Rahmen des Forschungsprojekts SchaKaSaB (Schadstoffarmes katalytisch stabilisiertes Brennkammerkonzept) soll eine Brennkammer für die katalytische Umsetzung von Wasserstoff ausgelegt, gefertigt und in einem für Kleingasturbinen relevanten Betriebsbereich getestet werden. Das Forschungsprojekt wird durch das Förderprogramm "Take Off" der österreichischen Forschungsförderungsgesellschaft (FFG) finanziert. Als Projektpartner ist noch die Firma SES-Tec in das Forschungsprojekt eingebunden.

Wie bereits erwähnt, werden durch die Anwendung der katalytischen Verbrennung sehr geringe Stickoxidwerte erwartet. Zusätzlich werden durch die Verwendung von Wasserstoff ( $H_2$ ) als Brennstoff keine weiteren Schadstoffe, wie Kohlenstoffmonoxid ( $CO$ ) und Kohlenstoffdioxid ( $CO_2$ ), produziert, da hier kein Kohlenstoff ( $C$ ) im Brennstoff gebunden ist.

Der Ablauf dieses Forschungsprojekts sieht vor, dass im ersten Arbeitsschritt eine Parameterstudie für diverse Katalysatoren durchgeführt werden soll. Dazu muss im Vorfeld eine umfassende Literaturrecherche, eine geeignete Auswahl an Katalysatoren und die Konstruktion eines zweckmäßigen Prüfstands durchgeführt werden. Parallel dazu wird vom Projektpartner SES-Tec ein neues Simulationsmodell zur Auslegung von Katalysatoren erstellt, welches anschließend mit den Erkenntnissen aus der Parameterstudie verifiziert und optimiert werden soll. Aufbauend auf den Ergebnissen aus diesen Arbeiten soll als letzter Schritt das finale Brennkammerkonzept für die Kleingasturbine entworfen, realisiert und experimentell untersucht werden.

Da auf diesem Gebiet am Institut für Thermische Turbomaschinen und Maschinendynamik noch keine Forschungsarbeiten durchgeführt wurden und somit noch keine Erfahrungswerte vorliegen, können die ersten Schritte nur anhand der Informationen aus der einschlägigen Literatur abgeschätzt werden. Wie sich im Rahmen der Literaturrecherche herausstellte, liegen jedoch speziell für die katalytische Umsetzung von Wasserstoff im Hochtemperaturbereich kaum Erfahrungsberichte vor.

## 1.2 Aufgabenstellung und Ziele

Ziel dieser Masterarbeit ist es den Prüfstand für die Parameterstudie bzw. für die ersten Testversuche auszulegen und zu konstruieren. Die Arbeit gliedert sich zu diesem Zweck in folgende Schwerpunkte.

### Übersicht der definierten Ziele:

- Literaturrecherche zur katalytischen Verbrennung
- Auswahl geeigneter Katalysatoren für die Parameterstudie
- Auslegung und Verifizierung eines Mischers zur Gewährleistung eines homogenen Brennstoff-Luft-Gemischs
- Auslegung und Konstruktion des Prüfstands

Zu Beginn wird eine umfassende Literaturrecherche durchgeführt, um einen Überblick für diese komplexe Thematik zu erhalten. Des Weiteren müssen geeignete Katalysatoren für die Testversuche ausgewählt werden. Neben den Informationen aus den diversen Literaturstellen, sollen hierzu auch ein einfaches Simulationsprogramm sowie die Informationen des Katalysatorherstellers als Entscheidungsgrundlage dienen. Zudem wird für die katalytische Verbrennung ein homogenes Brennstoff-Luft-Gemisch benötigt. Dafür wird im nächsten Schritt eine geeignete Mischapparatur entworfen und deren Anwendbarkeit mittels CFD-Simulationen überprüft. Die gewonnenen Erkenntnisse werden abschließend in ein geeignetes Brennkammerkonzept eingearbeitet.

# Kapitel 2

## Einführende Literatur

Im folgenden Kapitel werden für ein allgemeines Grundverständnis zu Beginn die wichtigsten Informationen bezüglich der Stickoxidbildung und des Energieträgers Wasserstoff erläutert. Anschließend folgt eine ausführliche Einführung in die Thematik der katalytischen Verbrennung.

### 2.1 Stickoxidbildung bei der Verbrennung

Unter dem Sammelbegriff Stickoxide ( $NO_x$ ) werden alle gasförmigen Oxide des Stickstoffs zusammengefasst, wobei die relevanten Schadstoffkonzentrationen nur in Form von Stickstoffmonoxid ( $NO$ ) und Stickstoffdioxid ( $NO_2$ ) auftreten. Die schädigende Wirkung des  $NO_x$  zeigt sich in vielen Bereichen. Zum Einen wird die Gesundheit des Menschen, durch Reizung und Schädigung der Atemwege, und zum Anderen die Umwelt, durch Bildung von Salpetersäure ( $\rightarrow$ Saurer Regen), Ozon oder Smog, stark beeinträchtigt[4].

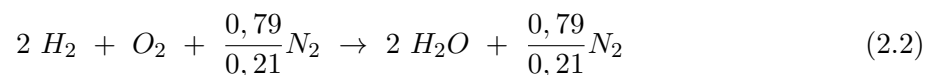
Stickoxide können in folgende drei Bildungsmechanismen unterteilt werden: Brennstoff- $NO_x$ , promptes  $NO_x$  und thermisches  $NO_x$ . Ersteres kommt dabei durch den im Brennstoff gebundenen Stickstoff zu Stande. Es wird ab etwa 800 °C gebildet und tritt vor allem bei der Kohleverbrennung auf. Für gasförmige Brennstoffe ist dieser Bildungsmechanismus nicht relevant. Das prompte  $NO_x$  entsteht vor allem durch die Reaktion von kohlenstoffhaltigen Verbrennungszwischenprodukten mit Stickstoff. Da im Rahmen dieses Projekts Wasserstoff als Brennstoff verwendet wird und daher kein Kohlenstoff vorkommt, ist hier auch dieser Bildungsmechanismus irrelevant. Der Hauptanteil der Stickoxide ist auf den in der Verbrennungsluft enthaltenen Stickstoff zurückzuführen, welcher im Verlauf der Verbrennung mit dem Sauerstoff reagiert und als thermisches  $NO_x$  in Erscheinung tritt. Die Bildung des thermischen  $NO_x$  ist stark temperaturabhängig und wird in etwa ab einer Temperatur von 1200 °C initiiert. Mit steigender Verbrennungstemperatur nimmt die  $NO_x$ -Bildung exponentiell zu[4].

Um nun die Produktion des thermischen  $NO_x$  zu unterbinden, soll in weiterer Folge die katalytische Verbrennung als primäre Entstickungstechnologie angewendet werden.

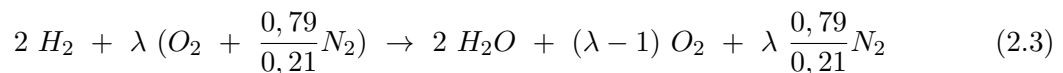
## 2.2 Wasserstoff als Brennstoff

Wasserstoff bietet sich als kohlenstofffreier Energieträger bestens für die zukunftsorientierte, schadstoffarme Energieerzeugung an. Da hier kein Kohlenstoff im Brennstoff gebunden ist, kann die Produktion des Treibhausgases  $CO_2$  total unterbunden und somit die Umwelt nachhaltig geschont werden. Auch die Gewinnung des Wasserstoffs durch Elektrolyse kann schadstofffrei durchgeführt werden, sofern dazu Strom, gewonnen aus erneuerbaren Energien (Wind, Wasser, Sonne), genutzt wird[5].

In Gl. (2.1)[5] ist die Bruttoreaktionsgleichung für die Verbrennung von Wasserstoff mit Sauerstoff unter stöchiometrischen Bedingungen angeführt. Dabei werden zwei Wasserstoffmoleküle mit einem Sauerstoffmolekül zu reinem Wasser umgesetzt. Da in den meisten technischen Anwendungen Luft und nicht reiner Sauerstoff zur Umsetzung verwendet wird, ist in Gl. (2.2) die Verbrennung von Wasserstoff mit Luft dargestellt. Vereinfacht kann angenommen werden, dass Luft zu 21 %vol aus Sauerstoff und zu 79 %vol aus Stickstoff besteht. Bei einer idealen Reaktion liegen als Produkte Wasser und der mit der Luft eingebrachte Stickstoff in unveränderter Form vor.

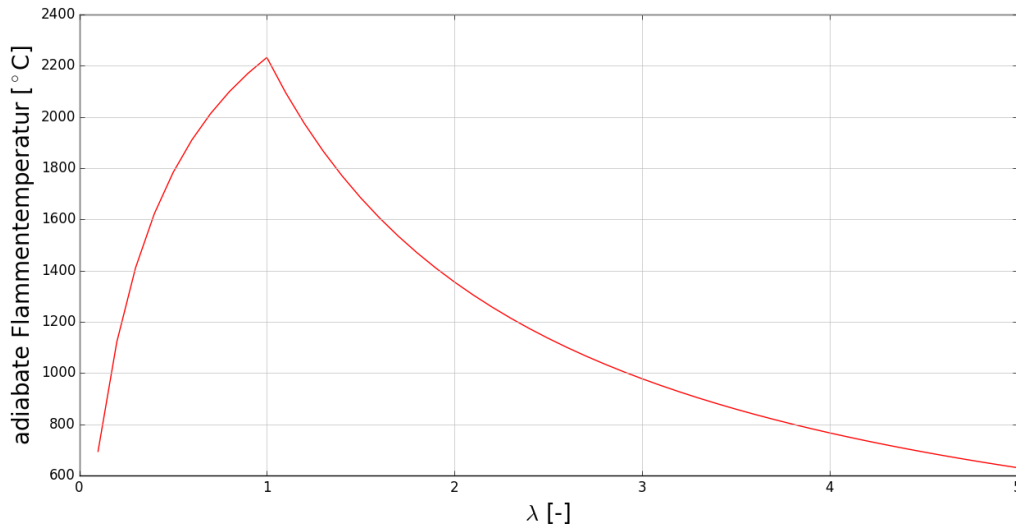


Bei der realen Verbrennung muss allerdings, um eine vollständige Umsetzung des Brennstoffes zu gewährleisten, ein Luftüberschuss ( $\lambda > 1$ ) bereitgestellt werden. Dadurch ergibt sich, wie in Gl. (2.3) zu sehen, im Abgas neben dem Stickstoff auch ein Anteil des überschüssigen Sauerstoffs.



In Abb. 2.1 wird die adiabate Flammtemperatur eines Wasserstoff-Luft-Gemischs in Abhängigkeit des Verbrennungsluftverhältnisses ( $\lambda$ ) dargestellt. Der Brennstoff und die Verbrennungsluft wurden für die Berechnung unter Normbedingungen (0 °C und 1,01325 bar) zugeführt. Es ist zu sehen, dass im Bereich des fetten Gemisches ( $\lambda < 1$ ) die Temperatur mit steigendem  $\lambda$  sehr rasch ansteigt, beim stöchiometrischen Brennstoff-Luft-Verhältnis ( $\lambda = 1$ ) das Maximum erreicht und nachfolgend mit zunehmendem Luftüberschuss ( $\lambda > 1$ ) kontinuierlich sinkt. Im brennstoffreichen Bereich ist die niedrigere Temperatur auf den Sauerstoffmangel, wodurch nur ein Teil des Brennstoffs umgesetzt werden kann, zurückzuführen. Der Grund für die sinkende Temperatur mit zunehmendem Luftüberschuss liegt darin, dass auch der für die Verbrennung unnötige Stickstoff bzw. der überschüssige Sauerstoff miterhitzt werden muss.

Zusätzlich wird bei realen Anwendungen, wie in Kap. 2.1 beschrieben, das unerwünschte  $NO_x$  gebildet. Die adiabate Verbrennungstemperatur liegt in einem  $\lambda$ -Bereich zwischen 0,3 und 2,5 über der Grenze von 1200 °C, wo die Produktion des thermischen  $NO_x$  beginnt.



**Abbildung 2.1:** Adiabate Flammtemperatur von Wasserstoff (Cantera)

In *Tab. 2.1* sind einige der wichtigsten Stoffeigenschaften des Wasserstoffs angeführt, welche nachfolgend für nähere Erläuterungen herangezogen werden.

Eigenschaft	Wert [Einheit]
Molmasse	2,016 <i>kg/kmol</i>
spezifische Gaskonstante $R$	4124 <i>J/kg</i>
Heizwert $H_u$	120 <i>MJ/kg</i>
<b>bei Normalbedingungen 0°C und 1,01325 bar:</b>	
spezifische Wärmekapazität $c_p$	14,32 <i>kJ/kg</i>
spezifische Wärmekapazität $c_v$	10,17 <i>kJ/kg</i>
Isentropenexponent $\kappa$	1,4
Diffusionskoeffizient	0,61 <i>cm<sup>2</sup>/s</i>
Schallgeschwindigkeit	1246 <i>m/s</i>
<b>Gemische mit Luft:</b>	
unter Explosionsgrenze (Zündgrenze)	4,0 <i>Vol% H<sub>2</sub></i> ( $\lambda = 10,1$ )
stöchiometrisches Gemisch	29,6 <i>Vol% H<sub>2</sub></i> ( $\lambda = 1,0$ )
obere Explosionsgrenze (Zündgrenze)	58,9 <i>Vol% H<sub>2</sub></i> ( $\lambda = 0,13$ )
Zündtemperatur	585 <i>°C</i>
maximale laminare Brenngeschwindigkeit	ca. 3 <i>m/s</i>
$Le$ -Zahl fettes Gemisch	$\sim 1,0$ [6]
$Le$ -Zahl mageres Gemisch	$\sim 0,3$ [6]

**Tabelle 2.1:** Eigenschaften des Wasserstoffs[5]

## 2.3 Katalytische Verbrennung

Die ersten Versuche zum Thema katalytische Verbrennung wurden von Pfefferle[7] in den 1970er Jahren durchgeführt. Dabei untersuchte er katalytische und nicht-katalytische Verbrennungsreaktionen in einem für beide Anwendungen relevanten Temperaturbereich unter Verwendung eines keramischen Wabenkatalysators mit parallelen Kanälen. Effektiv wurde diese Technologie allerdings erst in den frühen 90er Jahren zur Energieerzeugung eingesetzt. Erst zu diesem Zeitpunkt wurde erkannt, dass eine reine Optimierung der bis dahin bekannten Brennkammerkonzepte für die zu erwartenden Schadstoffgrenzwerte nicht ausreichen würde. Dabei kam zudem ein neuer Ansatz, wo nur ein Teil des Brennstoffes in einem metallischen Katalysator umgesetzt wird, zum Einsatz[8]. Seither wird intensiv in diesem Bereich geforscht und es wurden noch weitere verschiedene Anwendungsvarianten entwickelt, welche je nach Anforderung an das Brennkammerkonzept, entsprechend umgesetzt werden können. Im folgendem Kapitel werden das nötige Basiswissen sowie Erkenntnisse aus der Forschung zu diesem Thema präsentiert. Zunächst wird die Funktionsweise des Katalysators näher erläutert. Nachfolgend werden der Aufbau und die dazu nötigen Materialien im Detail erklärt. Abschließend werden die unterschiedlichen Anwendungsvarianten der Katalysatoren präsentiert.

### 2.3.1 Funktionsweise Katalysator

Bei der katalytischen Verbrennung wird im Allgemeinen ein zündfähiges homogenes Brennstoff-Luft-Gemisch über eine katalytisch reaktive Oberfläche geführt und dabei flammlos verbrannt. Die Funktionsweise eines Katalysators basiert auf der Senkung der Aktivierungsenergie  $E_a$ , wodurch die chemische Reaktion, im Vergleich zur reinen Gas-Phasen-Reaktion, schon bei einer Temperatur weit unter der eigentlichen Zündtemperatur des Gemischs stabil ablaufen kann. Aufgrund dieser Tatsache ist die Technologie auch unter der Bezeichnung CST (Catalytically Stabilized Thermal combustion) bekannt[9].

In *Abb. 2.2* ist die zu überwindende Aktivierungsenergie mit und ohne Katalysator für eine exotherme Reaktion  $A + B \rightarrow C + D$  dargestellt. Wie ersichtlich ist, muss für die Reaktion in Gegenwart eines Reaktionsbeschleunigers ein geringerer Energieaufwand bereitgestellt werden. Für die Rückreaktion  $C + D \rightarrow A + B$  müsste zusätzlich zu der Aktivierungsenergie der Hinreaktion noch die freigewordene Reaktionsenthalpie ( $-\Delta H$ ) aufgebracht werden[6].

Des Weiteren kann man bei der katalytischen Verbrennung zwischen heterogener und homogener Verbrennung unterscheiden. Erstere findet dabei an der Katalysatoroberfläche statt und ist sowohl durch die Präsenz von gasförmigen als auch von festen Reaktanten definiert. Die dabei entstehende Reaktionsenthalpie wird größtenteils durch Konvektion und Strahlung an das vorbeiströmende Gas abgeführt und kann dort zu einer reinen Gas-Phasen-Reaktion (homogene Reaktion) führen. Anders ausgedrückt, wird bei dieser Technologie die Verbrennung durch eine heterogene Reaktion an der Katalysatoroberfläche initiiert und dadurch die nachfolgende oder parallel ablaufende Gasphasenreaktion stabilisiert[9].

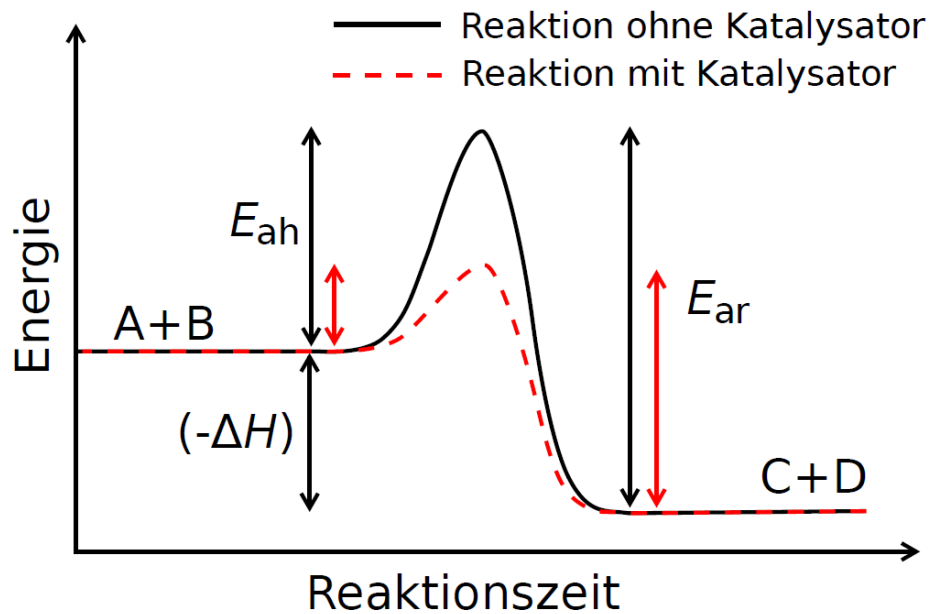


Abbildung 2.2: Aktivierungsenergie[6]

In Abb. 2.3 ist schematisch die heterogene Reaktion von Wasserstoff in einem Katalysator dargestellt. Dabei diffundieren die  $H_2$ - und die  $O_2$ -Moleküle aus dem Gasstrom zum Katalysator und werden an der Oberfläche adsorbiert. Durch die reaktionsbeschleunigende Wirkung des Katalysators werden die Stoffe in einer exothermen Reaktion oxidiert. Dabei kann dieser Oxidationsprozess sowohl zwischen rein adsorbierten Elementen als auch zwischen adsorbierten Stoffen und Reaktanten aus der Gasphase ablaufen. Das Katalysatormaterial selbst wird dabei nicht verbraucht und liegt nach Ablauf der Reaktion unverändert vor. Anschließend werden die neu produzierten Wassermoleküle ( $H_2O$ ) desorbiert und diffundieren zurück in das Gasgemisch[10].

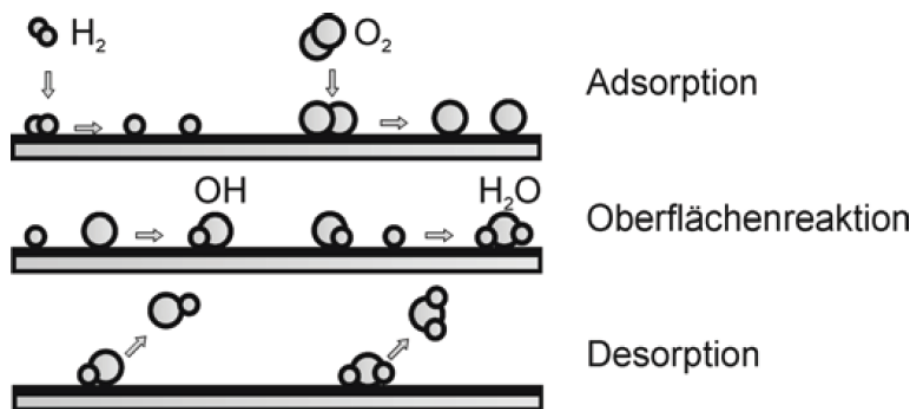
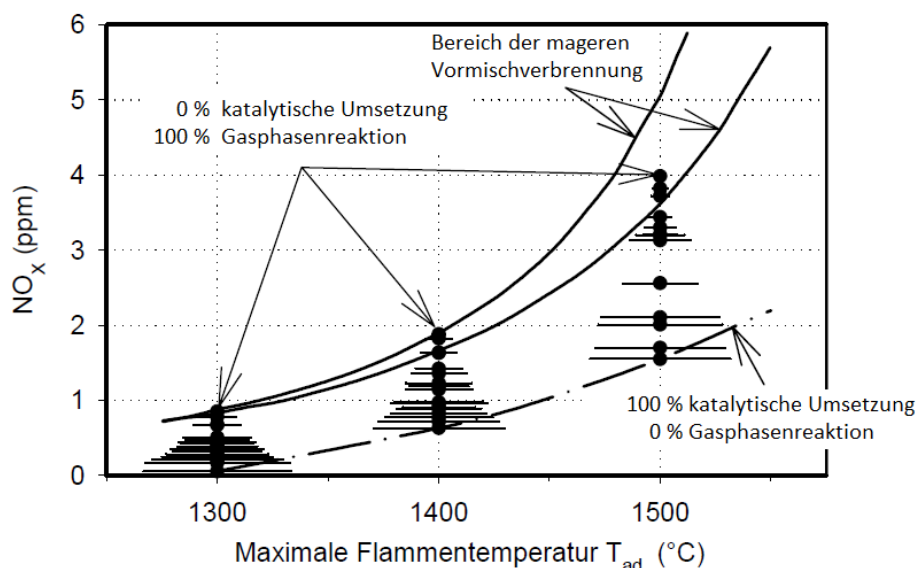


Abbildung 2.3: Heterogene Reaktion der Wasserstoff-Oxidation (schematisch)[10]



### 2.3.1.1 $NO_x$ -Reduktion

Wie bereits erwähnt, kann durch die katalytische Umsetzung des Brennstoffs bei niedrigen Temperaturen die Bildung von Stickoxiden drastisch reduziert werden. Dieses Verhalten ist in *Abb. 2.4*, wo eine magere Vormischverbrennung einer katalytische Umsetzung gegenübergestellt wird, anschaulich dargestellt. Bei dieser Untersuchung von Schlegel[11] wurde ein mageres Propan-Luft-Gemisch mit einer Eintrittstemperatur von 400 °C verwendet. Die strichpunktierte Linie zeigt dabei den Verlauf der  $NO_x$ -Konzentration, wenn der gesamte Brennstoff auf der Katalysatoroberfläche umgesetzt wird. Hingegen ist durch die durchgezogenen Linien der Bereich bei einer 100%igen Gasphasenreaktion dargestellt. Es ist zu sehen, dass mit steigender adiabater Flammtemperatur die  $NO_x$ -Konzentration zunimmt. Des Weiteren ist ein deutlicher Unterschied ersichtlich, je nachdem ob der Brennstoff am Katalysator oder in der Gasphase umgesetzt wird. Aus diesem Verhalten kann geschlossen werden, dass nach Möglichkeit der gesamte Brennstoff an der Katalysatoroberfläche umgesetzt werden sollte.



**Abbildung 2.4:**  $NO_x$ -Konzentration in Abhängigkeit der Verbrennungstemperatur, Gegenüberstellung von magerer Vormischverbrennung und katalytischer Verbrennung[11]

### 2.3.1.2 Wandtemperatur

Ein wichtiger Parameter zur Auslegung des Katalysators bzw. des Gesamtkonzepts der katalytischen Brennkammer ist die Oberflächentemperatur am Katalysator. Da der Brennstoff direkt an der Oberfläche umgesetzt wird, herrschen dort die höchsten Temperaturen, was sich beträchtlich auf die Stabilität des Katalysators auswirken kann. Durch die Wahl eines entsprechenden globalen Verbrennungsluftverhältnisses (z.B.:  $\lambda = 3,0$ ) kann die adiabate Verbrennungstemperatur des Gemisches beeinflusst werden. Grundsätzlich sollte dadurch die maximal an der Katalysatoroberfläche erreichbare Temperatur begrenzt werden können. Allerdings kann es durch

mehrere Möglichkeiten partiell zu einem, vom globalen Verbrennungsluftverhältnis, abweichenden Brennstoff-Luft-Gemisch kommen. Sofern sich das Mischungsverhältnis durch die Änderung dem stöchiometrischen Verbrennungsluftverhältnis ( $\lambda = 1$ ) annähert, führt dies zu sogenannten superadiabaten Verbrennungstemperaturen, welche über der adiabaten Flammtemperatur des Gemischs liegen und somit zu einer Zerstörung des Katalysators führen können. Entfernt sich das Mischungsverhältnis vom stöchiometrischen Verbrennungsluftverhältnis spricht man von unteradiabaten Verbrennungstemperaturen.

Superadiabate Verbrennungstemperaturen können beispielsweise durch eine inhomogene Durchmischung des Brennstoffs und der Luft vor dem Eintritt in den Katalysator entstehen. Dies kann allerdings durch einen entsprechenden Mischer, wodurch die benötigte Homogenität des Gemischs erreicht werden kann, unterbunden werden. Bei einer weiteren Möglichkeit ist der Diffusionskoeffizient des limitierenden Reaktanten ausschlaggebend. Im Falle der Umsetzung von Wasserstoff mit Luft ist unter mageren Bedingungen der Wasserstoff sowie unter fetten Bedingungen der Sauerstoff die limitierende Komponente. Beschrieben wird dieser Mechanismus durch die Lewiszahl ( $Le$ ). Die  $Le$ -Zahl einer Komponente (Gl. (2.4)) beschreibt das Verhältnis der Wärmeleitung des Gemischs zur molaren Diffusion der Komponente. Die Wärmeleitung kann dabei durch die Temperaturleitfähigkeit  $a$  oder, unter Hinzunahme der Dichte und der spezifischen Wärmekapazität, durch die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  ausgedrückt werden. Liegt die  $Le$ -Zahl in einem Bereich  $< 1$ , ist die Diffusionsgeschwindigkeit der limitierenden Komponente so groß, dass sich das Mischungsverhältnis an der Katalysatoroberfläche in Richtung des stöchiometrischen Verbrennungsluftverhältnis verschieben und es somit wiederum zu superadiabaten Verbrennungstemperaturen kommen kann[12].

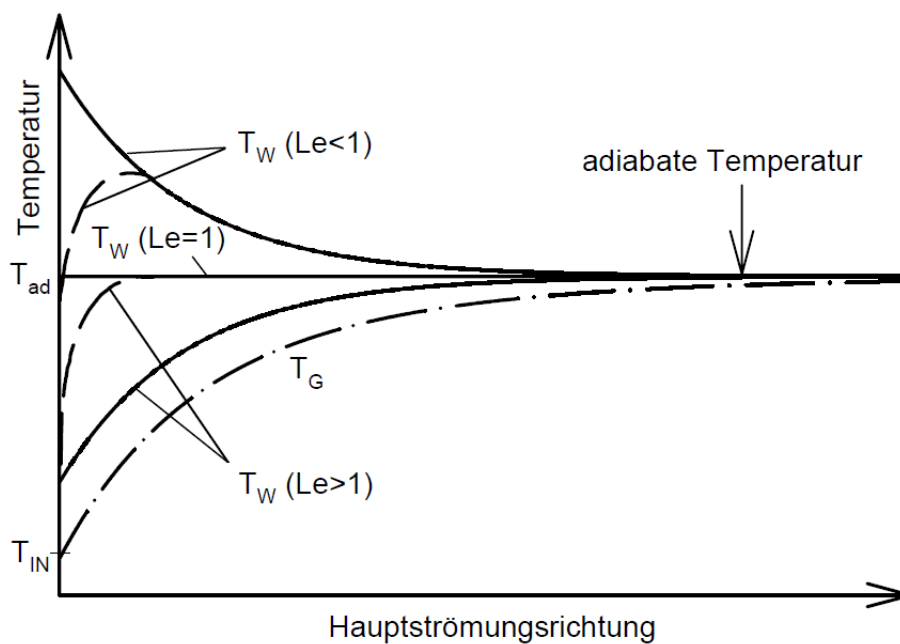
$$Le_k = \frac{a}{D_k} = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k} \quad (2.4)$$

Im Fall von mageren Wasserstoff-Luft-Gemischen liegt die  $Le$ -Zahl bei  $\sim 0,3$  (siehe Tab. 2.1). Ein ähnliches Verhalten kann auch bei anderen Brennstoffen mit einem hohen Wasserstoffanteil, beispielsweise Methan ( $Le \sim 0,95$ ), festgestellt werden.

Mantzaras[12] zeigt, dass die Oberflächentemperatur  $T_W$  (Gl. (2.5)) als eine Funktion der  $Le$ -Zahl geschrieben werden kann.  $T_G$  und  $T_{ad}$  beschreiben dabei die mittlere Gastemperatur sowie die adiabate Verbrennungstemperatur der Mischung. Die Variable  $\beta$  bezieht sich auf den Strömungszustand in der Katalysatorzelle ( $\beta = 0$  bei voll entwickelter Strömung,  $\beta = 1/3$  bei nicht entwickelter Strömung).

$$T_W = T_G + Le_B^{\beta-1} (T_{ad} - T_G) \quad (2.5)$$

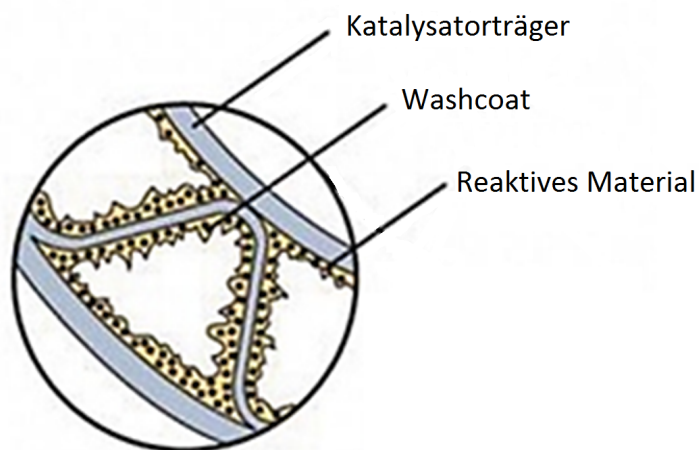
Je nach vorliegender Lewiszahl können nun superadiabate ( $Le < 1$ ), adiabate ( $Le = 1$ ) oder unteradiabate ( $Le > 1$ ) Oberflächentemperaturen abgeschätzt werden. In Abb. 2.5 sind die Temperaturverläufe verschiedener  $Le$ -Zahlen in Strömungsrichtung durch den Katalysator dargestellt. Die durchgezogenen Linien zeigen dabei die adiabaten Wandtemperaturverläufe. Durch die gestrichelten Linien sind Strahlungsverluste mitberücksichtigt. Die durch die katalytische Reaktion entstehende Wärme wird größtenteils durch den Gasstrom abgeführt. Wie durch die Strichpunktlinie ersichtlich ist, nähert sich die Gastemperatur daher der adiabaten Verbrennungstemperatur des Gemischs.



**Abbildung 2.5:** Temperaturverläufe in einem Katalysator in Abhängigkeit der  $Le$ -Zahl (nach [9])

### 2.3.2 Katalysatorstruktur

Grundsätzlich besteht ein Katalysator immer aus folgenden drei Bestandteilen: einem Katalysatorträger (Substrat), einem Washcoat (poröses Material) und einer Beschichtung aus reaktivem Material (siehe Abb. 2.6).

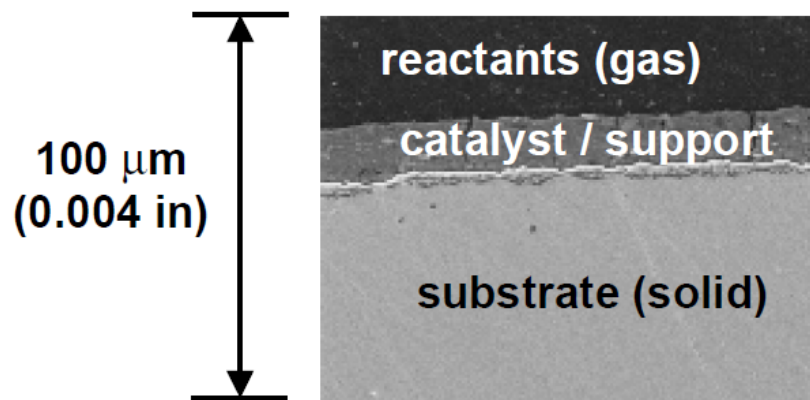


**Abbildung 2.6:** Aufbau eines Katalysators[13]

Der Katalysatorträger bildet dabei eine stabile Grundstruktur, auf welche der Washcoat und in weiterer Folge das reaktive Material aufgetragen werden. Durch ihn werden Anzahl, Form und Querschnittsfläche der einzelnen Zellen vorgegeben. Vorzugsweise wird der Katalysatorträger aus Metall oder Keramik gefertigt. Bei dem Washcoat handelt es sich um ein hochporöses

Material, welches zur Vergrößerung der Katalysatoroberfläche dient. Vereinfacht kann man sich hier einen Schwamm mit einem großen Hohlraumanteil vorstellen. Eine tausendfache Oberflächenvergrößerungen, bezogen auf die Oberfläche des Substrats, ist dadurch möglich. Dies ist nötig, um das reaktive Material auf eine möglichst große Fläche auftragen zu können. Durch die großflächige Verteilung des reaktiven Materials kann eine gute Reaktionsbasis und folglich ein schneller Ablauf der katalytischen Verbrennung erreicht werden[8].

In *Abb. 2.7* ist eine mikroskopische Schnittaufnahme mit einer Höhe von  $100\ \mu\text{m}$  eines solchen Katalysators dargestellt. Es handelt sich dabei um einen metallischen Katalysatorträger (substrate), welcher mit einem keramischen Washcoat (support) beschichtet ist. Die Schichtdicke des Washcoats kann mit etwa  $20\ \mu\text{m}$  abgeschätzt werden. Als katalytisch aktive Substanz, dient dabei ein fein über die Oberfläche des Washcoats verteiltes Edelmetall (catalyst). Im oberen Bereich der Abbildung ist noch das innere der Katalysatorzelle dargestellt, welches mit dem Brennstoff-Luft-Gemisch (reactants) durchströmt wird[8].



**Abbildung 2.7:** Mikroskopische Schnittaufnahme eines Katalysators[8]

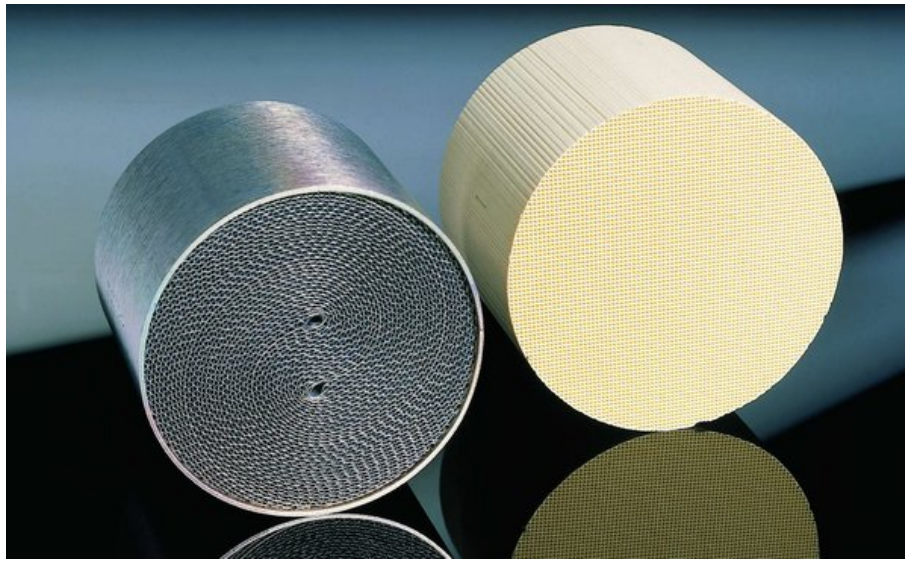
Vor allem zur Erreichung von möglichst geringen Zündtemperaturen wirkt sich eine hohe Dichte an aktiven Oberflächen positiv aus. In weiterer Folge ist nur eine geringe Vorwärmung des Brennstoff-Luft-Gemischs nötig, was sich wiederum in einer geringeren adiabaten Flammtemperatur auswirkt. Da das bei der Verbrennung gebildete  $NO_x$  eine Funktion der Temperatur ist, kann folglich die Schadstoffproduktion gesenkt werden[8].

Nachfolgend werden nun die einzelnen Bestandteile des Katalysators im Detail diskutiert.

### 2.3.2.1 Katalysatorträger (Substrat)

Katalysatorträger werden abhängig von ihrem Einsatzbereich, aus metallischen oder keramischen Werkstoffen, hergestellt (siehe *Abb. 2.8*). Sie müssen den Betriebsbedingungen in Gasturbinen, vor allem hinsichtlich entstehender Temperaturgradienten und thermische Schocks, standhalten. Am besten kann diesen Einflüssen durch die Verwendung von metallischen Substraten entgegen gewirkt werden. Allerdings sind sie hinsichtlich der Betriebstemperatur, um eine ausreichende Stabilität und Lebensdauer zu gewährleisten, auf  $950\ \text{°C}$  begrenzt. Für Anwendungen im Höchsttemperaturbereich ( $> 1000\ \text{°C}$ ) muss daher auf keramische Katalysatorträger ausgewichen wer-

den. Jedoch sind hier die Probleme mit der Thermoschockbeständigkeit bei instationären Betriebsbedingungen noch nicht vollkommen beseitigt und es haben sich bei CST-Anwendungen vorwiegend die metallischen Substrate durchgesetzt.[8].



**Abbildung 2.8:** Metallischer und keramischer Katalysatorträger[14]

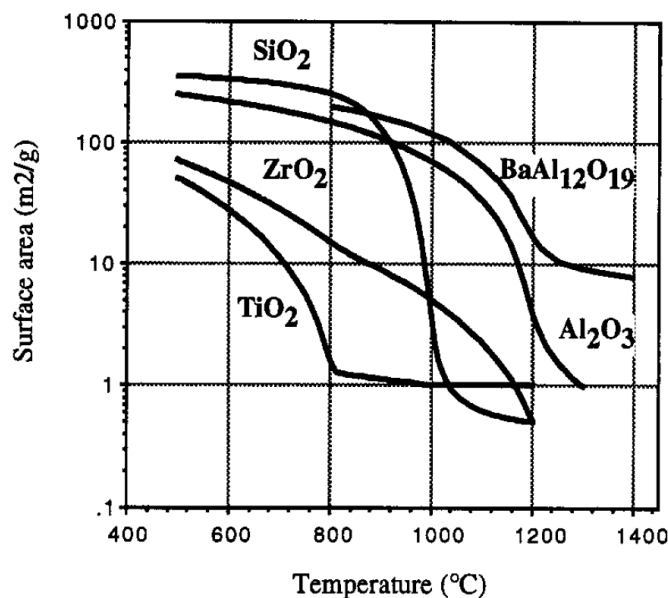
Des Weiteren kommen für CST-Anwendungen fast ausschließlich Waben-Monolithen mit parallelen Kanälen zur Anwendung. Diese können vor allem durch geringe Druckverlustwerte gegenüber anderen Varianten, wie beispielsweise Substrate mit Schaumstruktur, überzeugen. Ebenso kann eine große Oberfläche bezogen auf das Katalysatorvolumen erreicht werden[9]. Auch durch die Wahl der Geometrie (rund, viereckig, dreieckig, usw.) der Querschnittsfläche einer Zelle, kann Einfluss auf die Oberfläche pro Volumen genommen werden. Vorwiegend wird dies allerdings eher durch die geeignete Wahl der Anzahl an Zellen pro Querschnittsfläche *cpai* (cells per square inch) des Katalysators realisiert.

Neben sehr vielen Vorteilen der Waben-Monolithen muss an dieser Stelle allerdings auch ein Nachteil erwähnt werden. Vereinfacht kann hier jede Zelle des Katalysators als adiabater Reaktor angesehen werden. Kommt es nun z.B. infolge von Inhomogenitäten bei der Vormischung zu einem näherungsweise stöchiometrischen Brennstoff-Luft-Verhältnis im einströmenden Gas, kann dies partiell zu Temperatur Hot-spots und damit zur Zerstörung des Katalysators führen. Bei der Verwendung von Schaumstrukturkatalysatoren könnten diese Inhomogenitäten auch noch innerhalb des Substrats ausgeglichen werden[9].

### 2.3.2.2 Washcoat

Ein weiterer wichtiger Bestandteil des Katalysators ist der Washcoat. Wie bereits eingangs erwähnt, wird durch ihn die nötige Oberflächenvergrößerung zur Aufbringung des reaktiven Materials, um in weiterer Folge eine große aktive Fläche zu schaffen, gewährleistet. Hier ist vor allem die Oberflächenstabilität in Abhängigkeit der Betriebstemperatur, wie in *Abb. 2.9* für die gebräuchlichsten Washcoat-Materialien dargestellt, von großer Bedeutung. Es ist zu sehen, dass Siliziumoxid ( $SiO_2$ ) im Bereich der geringeren Temperaturen ein hervorragendes Material für

Washcoats ist, dessen Oberflächengröße allerdings ab einer Temperatur von etwa 850 °C rapide abfällt. Am thermisch beständigsten ist das Hexaaluminat ( $BaAl_{12}O_{19}$ ), welches bei 1200 °C noch eine Oberflächengröße von 65  $m^2/g$  aufweisen kann. Weitere Washcoat-Materialien, wie Zirkoniumoxid ( $ZrO_2$ ) oder Titanoxid ( $TiO_2$ ), welche von Grund auf eine bedeutend geringere Oberfläche aufweisen, werden nur in Kombination mit hoch reaktiven Substanzen, wie z.B. Palladium ( $Pd$ ) verwendet[3].



**Abbildung 2.9:** Oberflächengröße diverser Washcoats in Abhängigkeit der Temperatur nach einer 10-stündigen Erhitzung in Luft[3]

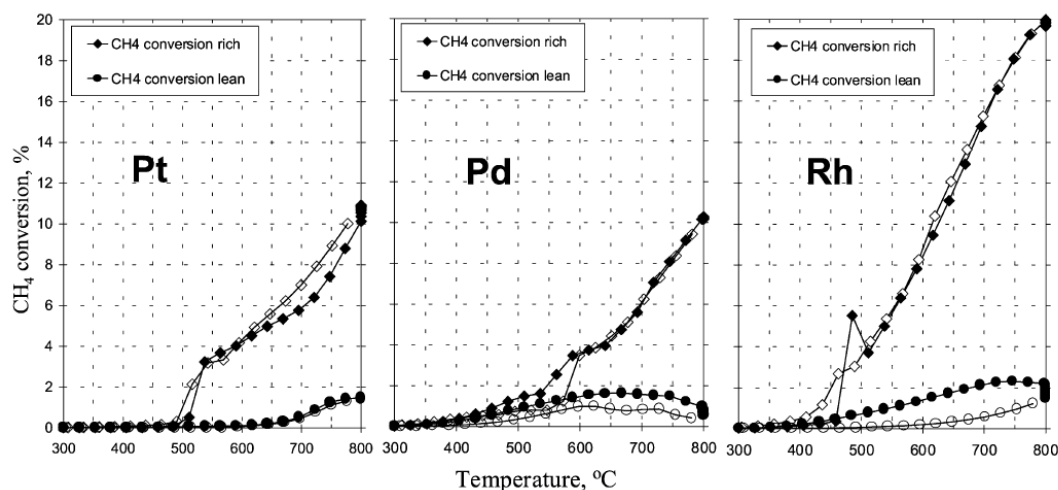
Durch die Zugabe von Stabilisatoren kann die Thermobeständigkeit einiger dieser Materialien noch erhöht werden. Beispielsweise kann  $\gamma - Al_2O_3$  einer der gängigsten Washcoats, welcher eine Oberfläche von bis zu 300  $m^2/g$  aufweisen kann, bis zu einer Temperatur von ca. 950 °C stabilisiert werden. Andernfalls würde bei etwa 750 °C ein Phasenwechsel zu  $\alpha - Al_2O_3$  stattfinden, wodurch die Oberfläche merklich verkleinert wird[9].

### 2.3.2.3 Reaktives Material

Der wichtigste Bestandteil des Katalysators ist das katalytisch aktive Material. Hier kommen vor allem Edelmetalle, wie Platin ( $Pt$ ), Palladium ( $Pd$ ) oder Rhodium ( $Rh$ ) zum Einsatz. Weitere Möglichkeiten bieten Metalloxide (z.B.  $Cr_3O_4$ ,  $Co_3O_4$ ,  $NiO$ ) und Perovskite (z.B.  $La_{0.5}Sr_{0.5}CoO$ ,  $LaCoO_3$ ), welche vorwiegend im Hochtemperaturbereich eingesetzt werden. Die Edelmetalle hingegen sind hinsichtlich der maximalen Betriebstemperatur begrenzt. Beispielsweise vollzieht Palladium, eines der reaktivsten Katalysatormaterialien, welches bei Umgebungstemperatur als  $PdO$  vorliegt, bei einer Temperatur im Bereich von 650 – 750 °C eine Transformation zum katalytisch inaktiven  $Pd$ . Die exakte Umwandlungstemperatur ist eine Funktion des partiellen Sauerstoffdrucks und der ganze Vorgang ist reversibel[15]. Eine weitere Einschränkung der Betriebstemperatur ist durch die Flüchtigkeit der Materialien gegeben. Erhebungen

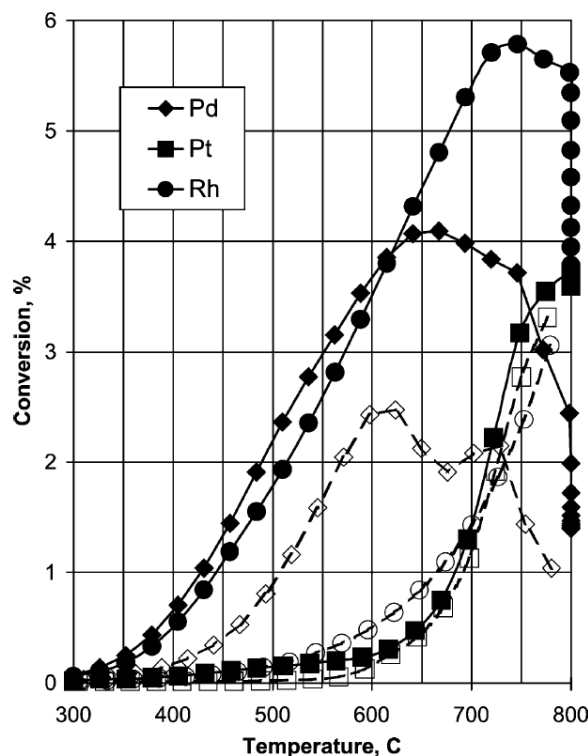
von Dalla (1997)[3] haben ergeben, dass z.B. ein *Pt*-Katalysator, welcher im Vergleich zum *Pd*-Katalysator bei höheren Temperaturen eingesetzt werden kann, bei einer Temperatur von 1000 °C innerhalb eines Zeitraumes von nur 15 Stunden 70 % des Materials verliert. Um eine entsprechende Lebensdauer des Katalysators zu gewährleisten, sollte die Einsatztemperatur daher entsprechend geringer angesetzt werden. Auch bei Smith (2006)[8] wird eine Betriebstemperatur weit unter 950 °C empfohlen. Aus diesem Grund wird für weitere Erläuterungen eine Maximaltemperatur von 900 °C angesetzt.

Ein Vergleich der Methan-Umsetzungsraten in Abhängigkeit der Temperatur für die drei Edelmetalle ist in *Abb. 2.10* dargestellt. Dabei sind hier die Verläufe sowohl für magere ( $\lambda = 3$ ), als auch für fette ( $\lambda = 0.33$ ) Bedingungen dargestellt. Um den Temperatureinfluss auf die Katalysatoraktivität zu messen, wurde die Reaktortemperatur kontinuierlich in Schritten von 2 °C/min von 300 °C auf 800 °C erhöht, 2 Stunden auf dieser Temperatur gehalten und anschließend in gleichen Schritten wieder auf 300 °C reduziert. Die Resultate für den Aufheizzyklus werden durch die gefüllten Symbole und für den Abkühlzyklus durch die leeren Symbole repräsentiert. Auf den ersten Blick ist ersichtlich, dass die Umsetzung des Brennstoffs für alle drei Materialien unter fetten Bedingungen wesentlich größer ist als unter mageren Konditionen. Die Zündtemperaturen aller drei Katalysatoren liegen bei dem fetten Brennstoff-Luft-Gemisch zwischen 400 – 500 °C[16].



**Abbildung 2.10:** Katalysatoraktivität bei der Umsetzung von Methan unter mageren und fetten Bedingungen[16]

In *Abb. 2.11* sind die Umsetzungsraten unter mageren Bedingungen nochmals im Detail dargestellt. Hier ist vor allem der Einbruch der Aktivität des *Pd*-Katalysators bei ca. 650 °C sehr gut ersichtlich. Weiters fällt auf, dass der *Rh*-Katalysator annähernd die gleiche Aktivität wie der *Pd*-Katalysator aufweist und noch bis zu einer Temperatur von etwa 750 °C aktiv bleibt. Allerdings ist die Deaktivierung des *Rh*-Katalysators, wie anhand des Abkühlverlaufs zu sehen ist, im Vergleich zum *Pd*-Katalysator irreversibel. Im Gegensatz zu den Ergebnissen der beiden anderen Materialien, zeigt *Pt* keine Deaktivierung oder Hystereseschleife zwischen Aufheiz- und Abkühlzyklus[16].



**Abbildung 2.11:** Katalysatoraktivität bei der Umsetzung von Methan unter mageren Bedingungen[16]

Im Vergleich zu den obigen Erläuterungen wurden bei Brennstoffen mit einem hohen Wasserstoffanteil (25 %) sowohl bei fetten als auch bei mageren Brennstoff-Luft-Gemischen, bereits Zündtemperaturen von unter 180 °C gemessen[8]. Ebenso bei Experimenten mit reinem Wasserstoff, wie von Kramer[17] und Haruta[18] im Niedertemperaturbereich (< 250 °C) bei sehr mageren Bedingungen und sehr geringen Strömungsgeschwindigkeiten durchgeführt, wo Zündtemperaturen, bei der Verwendung von *Pd*- und *Pt*-Katalysatoren, von unter 100 °C bis hin zu Umgebungstemperaturen nachgewiesen werden konnten.

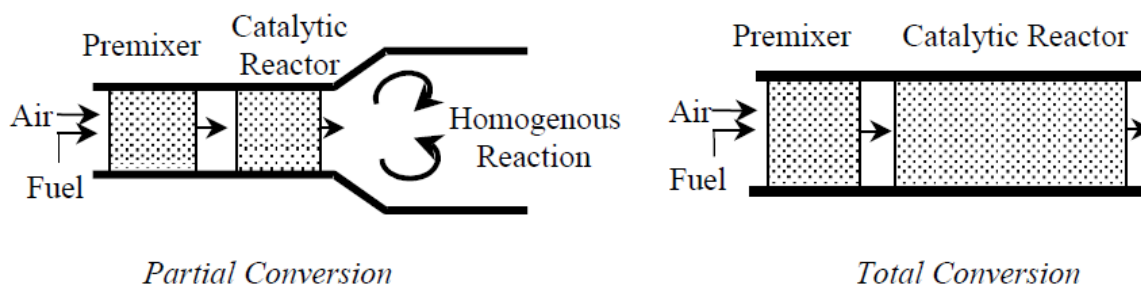
Daher kann für die im Rahmen dieses Projekts folgenden Experimente, unter Verwendung von Wasserstoff, ebenso von sehr geringen Zündtemperaturen ausgegangen werden. Diese geringe Vorwärmung der Luft bzw. des Gemischs kann bei Gasturbinenanwendungen schon bei geringen Druckverhältnissen in der Verdichterstufe vor der Brennkammer erreicht werden und es ist keine Vorwärmung oder ein Vorbrenner, wie bei vielen Erdgas- und Methananwendungen, zur Erreichung der nötigen Katalysatoreintrittstemperatur erforderlich.

### 2.3.3 Anwendungsvarianten

Je nach Anwendungsbereich (Nieder-, Hoch- und Ultra-Hochtemperaturturbinen) können für die katalytische Verbrennung verschiedene Varianten eingesetzt werden. Im Allgemeinen wird hier zwischen ein- und zweistufiger Umsetzung, wie in *Abb. 2.12* zu sehen, unterschieden. Dabei handelt es sich bei der einstufigen Umsetzung um ein relativ einfaches System, wo nur ein Vormischer für ein homogenes Brennstoff-Luft-Gemisch sowie ein Katalysator nötig sind. Bei der zweistufigen



gen Umsetzung wird das Konzept um einen Liner erweitert, um dort die homogene Verbrennung des restlichen Brennstoffs, welcher nicht im Katalysator umgesetzt wird, sicherzustellen[8].



**Abbildung 2.12:** Schematische Darstellung einer 2-stufigen (Partial Conversion) und einer 1-stufigen (Total Conversion) katalytischen Brennkammer[8]

### 2.3.3.1 Totale Umsetzung

Bei der totalen Umsetzung ist zu beachten, dass der gesamte Brennstoff im Katalysator verbrannt werden muss. Um das innerhalb einer entsprechenden Katalysatorlänge bzw. Aufenthaltszeit zu gewährleisten, ist eine Gasphasenverbrennung nötig. Eine rein heterogene Umsetzung ohne Gasphasenreaktion würde die Diffusion des gesamten Brennstoffs an die Katalysatoroberfläche erfordern, damit dort die chemische Reaktion ablaufen kann. Allerdings würde das in einer unvermeidbaren Katalysatorlänge, Katalysatorquerschnittsfläche oder Zellengröße resultieren. Daher muss bei der totalen Umsetzung eine entsprechende katalytische Reaktion stattfinden, um mit der daraus resultierenden Wärmefreisetzung eine Selbstzündung des Gemisches in der Gasphase zu gewährleisten. Früheren Überlegungen zufolge sollte mindestens eine Verbrennungstemperatur von 1100 °C erreicht werden, um eine komplette Umsetzung des Brennstoffes innerhalb einer angemessenen Aufenthaltszeit zu erreichen. Bei diesen Temperaturen können, aufgrund der geringeren thermischen Belastbarkeit von metallischen Katalysatorträgern, nur keramische Substrate verwendet werden [8] (Details siehe *Kap. 2.3.2.1*).

Neben der klassischen einstufigen Umsetzung mit einem Vormischer und einem homogenen Katalysator, kann die Verbrennung auch mit mehreren kurzen aufeinanderfolgenden Katalysatorstufen durchgeführt werden. Je nach axialer Position und den dort herrschenden Bedingungen kann dementsprechend eine Reihe mit Katalysatoren aus verschiedensten Materialien gebildet werden. In einem solchen Fall wird der erste Katalysator für eher niedrige Temperaturen ausgelegt, hat jedoch gegenüber den nachfolgenden Katalysatoren, welche höheren Betriebstemperaturen standhalten müssen, Vorteile hinsichtlich der katalytischen Aktivität. Durch diese Maßnahmen kann z.B. die Eintrittstemperatur des Brennstoff-Luft-Gemischs reduziert und dennoch ein erfolgreiches Zünden des Katalysators garantiert werden (Siehe *Kap. 2.3.2.3*).

Eine weitere Anwendungsvariante der totalen Umsetzung ist in *Abb. 2.13* abgebildet. Diese Technologie ist unter Bezeichnung i-CST (inverse-CST) bekannt. Hier wird zur Erreichung der nötigen Katalysatoreintrittstemperatur ein Vorbrenner eingesetzt, um die Initiierung der katalytischen Reaktion im Katalysator zu gewährleisten. Der Katalysator wird für sehr hohe Temperaturen ausgelegt, was einen negativen Einfluss auf die Aktivität des Katalysators hat und somit

die Vorwärmung des einströmenden Gemischs verlangt. Bei der vorangehenden Gasphasenverbrennung wird aufgrund einer sehr kurzen Reaktionszeit und dem unmittelbar nachfolgenden Eintritt in den Katalysator nur ein Teil des Brennstoffes umgesetzt. Der restliche Ausbrand wird im Katalysator erreicht. Die maximale Temperaturbeanspruchung des Katalysators wird in diesem Fall durch die adiabate Flammtemperatur der Mischung vorgegeben. Daher können hier nur Gemische unter entsprechend mageren Bedingungen verbrannt werden. Hingegen kann es bei der Verwendung von Wasserstoff als Brennstoff, wie in *Kap. 2.3.1.2* beschrieben, zu superadiabaten Oberflächentemperaturen im Katalysator kommen[19].

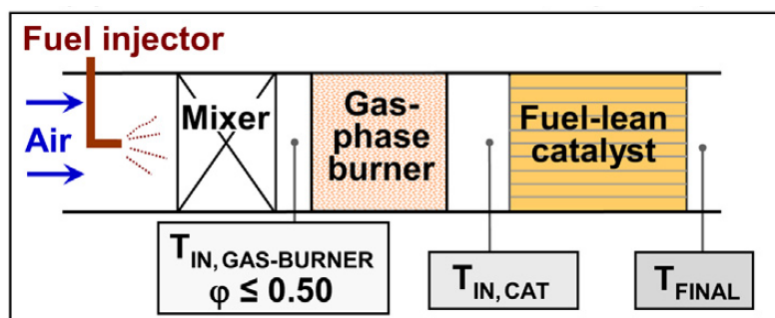


Abbildung 2.13: Inverses Konzept unter mageren Bedingungen (i-CST)[19]

### 2.3.3.2 Gestufte Umsetzung

Da sich bei Gasturbinenanwendungen die Verwendung von metallischen Katalysatorträgern aufgrund der mechanischen Eigenschaften vorwiegend durchgesetzt hat, wird in weiterer Folge davon ausgegangen, dass die maximale Katalysatortemperatur mit 900 – 950 °C begrenzt ist.

Bei der gestuften Verbrennung wird nur ein Teil des Brennstoffes in der Katalysatorstufe umgesetzt. Der restliche Brennstoff wird erst nach dem Katalysator in einer homogenen Gasphasenreaktion verbrannt. Um eine einwandfreie Funktion dieser Technologie zu gewährleisten, muss die Reaktivität und folglich auch die Temperatur in der Katalysatorstufe dahingegen limitiert werden, dass die Betriebsbedingungen innerhalb der maximal erlaubten Grenzen bleiben. Die Reaktionsrate des Katalysators kann durch mehrere Möglichkeiten beeinflusst werden. Beispielsweise durch eine maximale chemische Reaktionsrate des Katalysators, durch eine Limitierung der Diffusionsrate der Reaktanten zum Katalysator oder durch vereinzelt Kanäle, welche nicht mit reaktiven Material überzogen sind. Unabhängig von der gewählten Limitierung, ist eine unkontrollierte Gasphasenreaktion in den Zellen des Katalysators unbedingt zu vermeiden. Hingegen dazu muss in der zweiten Stufe die Initiierung der Gasphasenreaktion sichergestellt werden. Dazu gibt es zwei Möglichkeiten. Zum Einen kann die Verbrennung durch eine Abgasrezirkulation, wie bei der gestuften Umsetzung in *Abb. 2.12* zu sehen, stabilisiert werden. Die andere Möglichkeit ist, eine automatische Zündung, welche durch die Katalysatorstufe kontrolliert wird zu erreichen. Hier besteht allerdings die Gefahr, dass die Gasphasenverbrennung schon im Katalysator stattfindet oder es im Laufe des Betriebs zu einer Rückzündung bis in die Katalysatorstufe kommt[8].

In *Abb. 2.14* ist die katalytische Verbrennung eines mageren Brennstoff-Luft-Gemischs dargestellt. Die Luft und der Brennstoff werden dabei durch die Verwendung eines Mixers zu einem

homogenen Gemisch vermischt, nachfolgend in die Katalysatorstufe geführt und abschließend in einer homogenen Reaktion restlos umgesetzt[19].

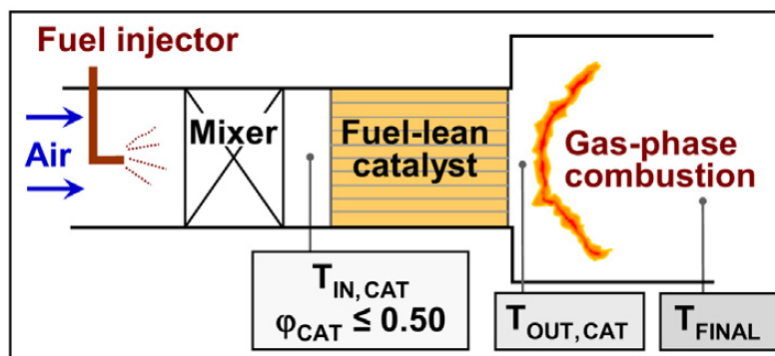


Abbildung 2.14: Katalytische Verbrennung unter mageren Bedingungen (CST)[19]

Eine weitere Möglichkeit für die gestufte Umsetzung besteht darin, ein fettes Brennstoff-Luft-Gemisch durch den Katalysator zu schicken. Durch den Mangel an Sauerstoff kann hier nur ein Teil des Brennstoffs im Katalysator umgesetzt werden, was sich auch ideal zur Regulierung der Betriebsbedingungen im Katalysator eignet. Am Austritt des Katalysators liegt nun ein heißes Gas mit vorwiegend unverbrannten Reaktanten vor. Durch die Einbringung der Sekundärluft (Bypass air) wird nun der unverbrannte Brennstoff in einer Gasphasenreaktion umgesetzt. Das heiße Gas dient in diesem Fall zur Zündung und Stabilisierung der Reaktion und es bildet sich nach dem Katalysator eine Diffusionsflamme[19].

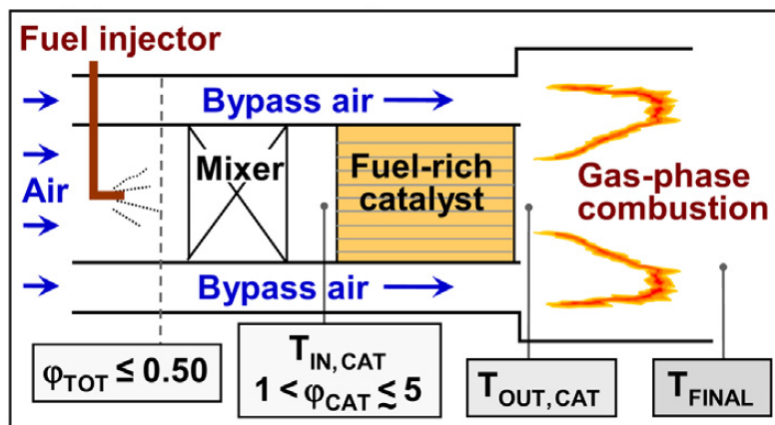


Abbildung 2.15: Katalytische Verbrennung unter fetten Bedingungen[19]

Wie bereits erwähnt, können bei dieser Anwendung die Betriebsbedingungen im Katalysator sehr gut mit der Wahl des entsprechenden Verbrennungsluftverhältnisses geregelt werden. Wird in der Katalysatorstufe der gesamte Sauerstoff verbraucht und die maximal erlaubte Temperatur dennoch nicht überschritten, kann eine Zerstörung durch Rückzündung und folglich zu hoher Temperatur ausgeschlossen werden. Ähnlich wie bei dieser Anwendung, kann durch die Bypass-Leitung auch zusätzlich noch ein mageres Brennstoff-Luft-Gemisch eingebracht werden[19]. Aufbauend auf diesen Informationen wird im nächsten Kapitel die Auswahl geeigneter Katalysatoren beschrieben.

# Kapitel 3

## Auswahl geeigneter Katalysatoren

In diesem Kapitel werden, aufbauend auf den Informationen aus *Kap. 2*, weitere Faktoren beschrieben, welche in die Auswahl der Katalysatoren eingeflossen sind. Dazu zählen Detailinformationen zu Experimenten aus ausgewählten Papers, ein Simulationsprogramm sowie Informationen und das mögliche Lieferprogramm des Katalysatorherstellers Heraeus. Folgende Parameter wurden für die Katalysatorauswahl herangezogen:

### Parameter für die Katalysatorauswahl:

- Geometrie (Länge, Durchmesser)
- Zellenanzahl
- Katalysatorträger-Material
- Washcoat-Material
- Reaktives Material
- Menge des reaktiven Materials (Beladung)

### 3.1 Details aus Experimenten

Wie in *Kap. 2* beschrieben zählen der verwendete Brennstoff, die Katalysatormaterialien sowie die gewählte Umsetzungsvariante zu den wichtigsten Parametern bei der katalytischen Verbrennung. Um ein Experiment durchführen zu können, muss das Gesamtkonzept darüber hinaus auch noch hinsichtlich der Strömungsgeschwindigkeiten, welche die Verweilzeit im Katalysator definiert, und hinsichtlich der Geometrien (Durchmesser, Länge, cpsi) abgestimmt werden. Der Durchmesser wirkt sich allerdings nur auf den Massen- bzw. Volumenstrom aus und ist daher von untergeordneter Bedeutung. Um hier einen kleinen Überblick zu schaffen, werden nachfolgend die gewählten Betriebsbedingungen und Materialparameter für zwei Gesamtkonzepte kurz beschrieben.

Griffin[20] hat das Konzept der totalen Umsetzung angewendet. Bei der ersten Versuchsreihe wurde das Luftverhältnis  $\lambda$  im Bereich von 2,0 - 5,0 variiert, wobei die Katalysatoreintritts-

bedingungen ( $T_{in} = 380 \text{ °C}$ ,  $v_{in} = 19 \text{ m/s}$ ) weitgehend konstant gehalten wurden. Bis zu einem Brennstoffanteil von 3,05% ( $\lambda = 3,3$ ) konnten hier eine homogene Gasphasenreaktion und Temperaturen über  $1100 \text{ °C}$  im Katalysator festgestellt werden. Bei einer weiteren Versuchsreihe, wo lediglich die Katalysatoreintrittsgeschwindigkeit auf  $v_{in} = 22 \text{ m/s}$  erhöht wurde, konnten im Katalysator nur noch Temperaturen zwischen  $750 - 800 \text{ °C}$  nachgewiesen werden. Bei einer kontinuierlichen Erhöhung des Luftverhältnisses wurde das Erlöschen der homogenen Gasphasenreaktion ab  $\lambda = 2.5$  festgestellt. Die Zündung im Katalysator konnte hingegen bis zu  $\lambda = 5,0$  aufrecht gehalten werden. Aus diesen Ergebnissen ist ersichtlich, dass die Strömungsgeschwindigkeit einen großen Einfluss auf die katalytische Reaktion hat. In *Tab. 3.1* sind die wichtigsten Parameter zu diesem Experiment angeführt.

Parameter	Wert
Brennstoff	Methan $CH_4$
Katalysatorträger	Keramik Wabenkatalysator
Washcoat	stabilisiertes $Al_2O_3$
Reaktives Material	$Pd$
cpsi	173
Katalysatorlänge	75 mm
Einströmgeschwindigkeit	20 - 25 m/s

**Tabelle 3.1:** Experimentparameter Griffin[20]

Bei Ozawa[21] wurde das Konzept einer gestuften Umsetzung angewendet. Das globale Verbrennungsluftverhältnis wurde im Bereich zwischen  $2,0 - 2,3$  gewählt, wobei der Brennstoff auf den Strom durch den Katalysator sowie auf den Sekundärluftstrom aufgeteilt wurde. Der Anteil des Brennstoffmassenstroms in den beiden Strömen wurde dahingehend gewählt, dass die Katalysatorbetttemperatur zwischen  $800 - 1000 \text{ °C}$  gehalten werden konnte. Genaue Werte wurden hier nicht weiter angeführt. Die Katalysatoreintrittstemperatur wurde mit  $400 \text{ °C}$  gewählt und aufgrund der angegebenen Daten konnte in etwa auf eine Katalysatoreintrittsgeschwindigkeit von  $\sim 27 \text{ m/s}$  geschlossen werden.

Parameter	Wert
Brennstoff	Erdgas (80 % $CH_4$ )
Katalysatorträger	Keramik Wabenkatalysator
Washcoat (g/l)	stabilisiertes $Al_2O_3$ (80), $ZrO_2$ (20)
Reaktives Material (g/l)	$Pd(20)/Pt(5)$ , $Pd(20)/Pt(5)/Rh(2)$
cpsi	60 , 200
Katalysatorlänge	100 mm
Einströmgeschwindigkeit	$\sim 27 \text{ m/s}$

**Tabelle 3.2:** Experimentparameter Ozawa[21]

## 3.2 Simulationsprogramm für die katalytische Verbrennung

Um die Auswahl der Katalysatoren zu unterstützen und vor allem um eine Abschätzung der Katalysatorlänge tätigen zu können, wurde ein 1-dimensionales Simulationsprogramm erstellt, welches den Reaktionsablauf in axialer Richtung über eine bestimmte Katalysatorlänge wiedergeben soll.

Das Programm wurde in der Programmiersprache PYTHON verfasst, eine weit verbreitete und für die einfache Handhabung bekannte Open-Source-Software. Für die Ermittlung der thermodynamischen Gaszustände und Transportvorgänge sowie für die reaktionskinetischen Abläufe im Programm wurden zudem die Chemie-Software CANTERA verwendet. Diese Software wird vor allem bei Anwendungen im Bereich der Verbrennung, Detonationen, elektrochemischen Energieumwandlung und Speicherung, Brennstoffzellen, Batterien, wässrigen Elektrolytlösungen, Plasmen und Dünnschichtabscheidung verwendet.[22] Der zu Grunde liegende Quellcode "*surf\_pfr.py*" für das Simulationsprogramm wurde aus der CANTERA-Beispielsammlung entnommen und für diesen Anwendungsfall, der katalytischen Umsetzung von Wasserstoff, abgeändert. Dabei wurde der Großteil der Modifikationen durch die Firma SES-Tec durchgeführt (Details siehe *Kap. 3.2.2*).

Zusätzlich wird für das Programm der Reaktionsmechanismus "*ptcombust.cti*" verwendet. Dieser wurde von Deutschmann[23] erstellt und steht im Internet zur freien Verfügung. Dabei handelt es sich um einen auf den "*GRI – Mech 3.0*" basierenden und für katalytische Reaktionen mit *Pt* abgeänderten Mechanismus. Die darin enthaltenen chemischen Reaktionen sind für die Verbrennung von Erdgas ausgelegt. Eine Liste der Eigenschaften des chemischen Reaktionsmechanismus ist nachfolgend zu sehen.

### Reaktionsmechanismus "*ptcombust.cti*":

- Enthält alle möglichen chemischen Reaktionen (auch jene die an der Katalysatoroberfläche stattfinden)
- Enthält alle Informationen über Eigenschaften sowie Reaktionskinetik der einzelnen Spezies
- Definiert die Zusammensetzung im Gas sowie an der Oberfläche
- Die chemischen Reaktionen sind durch den Arrhenius-Ansatz beschrieben

### 3.2.1 Schematischer Aufbau

Der Aufbau des Programms sieht vor, dass der gesamte Katalysator durch eine Kette von null-dimensionalen Reaktoren approximiert wird. Wie in *Abb. 3.1* zu sehen, wird zu Beginn ein Gasgemisch definiert, in weiterer Folge über das Reaktornetzwerk geführt und nach Ablauf der Reaktion in einem Abgasreservoir aufgefangen. Dabei besteht jeder einzelne Reaktor des gesamten Netzwerks aus zwei Reservoirs, einer Wand, einem Idealen-Gas-Reaktor sowie einem Massenstromregler und einem Ventil. Bei all diesen Bauteilen handelt es sich um diverse Klassen des Chemie-Moduls CANTERA, welche nachfolgend noch detailliert beschrieben werden.

In den beiden Reservoirs wird der aktuelle Zustand (Temperatur, Druck, Speziesmassenbrüche, usw.) des Gasgemischs gespeichert. Dabei wird das erste Zuströmreservoir mit dem thermodynamischen Zustand des Gemischs vor dem Katalysator initiiert. Für jedes weitere Zuströmreservoir werden die Daten aus dem Abströmreservoir des vorangegangenen Reaktors herangezogen. Die hier gespeicherten Daten werden nachfolgend auch für die Auswertungen der Ergebnisse verwendet. Die Wand und der Ideale-Gas-Reaktor dienen zur Initiierung und Berechnung der katalytischen Reaktion. Unter anderem kommt an dieser Stelle der oben erwähnte Reaktionsmechanismus zum Einsatz. Des Weiteren müssen noch Strömungsorgane wie, Massendurchflussregler und Ventil, in das Programm eingearbeitet werden, um den Gastransport zwischen den Reservoirs und den Gasreaktoren zu gewährleisten. Durch den Massendurchflussregler wird, wie der Name schon sagt, auch der Massendurchsatz und folglich auch die Verweilzeit des Gemischs im Reaktor bestimmt.

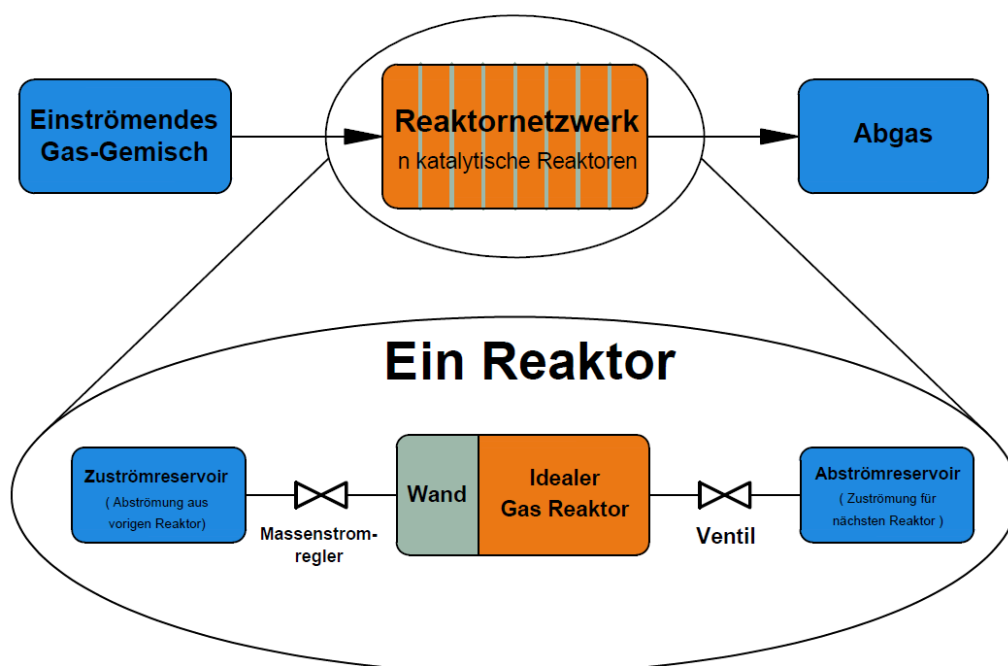


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau des Reaktornetzwerks

### 3.2.2 Berechnungsablauf des Simulationsprogramms

Nachfolgend wird im Detail der Berechnungsablauf des Simulationsprogramms beschrieben. Die folgenden Formeln stammen aus dem von der Firma SES-Tec erstellten Programm. Durch den Autor dieser Arbeit wurde das Programm lediglich um die ersten fünf Formeln (Gl. (3.1)–Gl. (3.5)) erweitert und zur besseren Veranschaulichung die Reihenfolge der Formeln teilweise verändert. Die Erläuterungen zu den einzelnen CANTERA-Klassen stammen aus der CANTERA-Dokumentation[22].

Die nötigen Eingabeparameter für das Programm sind in Tabelle 3.3 angeführt. Durch die ersten vier Parameter, Katalysatordurchmesser, Katalysatorlänge,  $psi$  und  $OFA$ , wird die Geometrie des Katalysators beschrieben. Der  $psi$ -Wert ist dabei eine gebräuchliche Variable aus der ein-

schlägigen Literatur und beschreibt die Anzahl der Katalysatorzellen pro Quadrat-Inch. Durch den *OFA*-Wert wird jener prozentuale Anteil der Katalysatorquerschnittsfläche beschrieben, der vom Gemisch in Strömungsrichtung durchflossen werden kann und nicht durch die Zellenstruktur des Katalysators versperrt wird. Werden diese Parameter verändert, kann vor allem die Größe der katalytischen Oberfläche beeinflusst werden.

Die Temperatur, der Druck, die Strömungsgeschwindigkeit und das Verbrennungsluftverhältnis liefern die nötigen Informationen für den thermodynamischen Zustand und die Zusammensetzung des Gasgemischs. Um eine möglichst realitätsnahe Simulation zu tatsächlichen Turbinen zu schaffen, wird das Gasgemisch vor dem Eintritt in die Reaktorkette noch über eine Verdichterstufe komprimiert. Je nach Verdichtungsverhältnis und Wirkungsgrad des Verdichters ändert sich neben dem Druck auch die Eintrittstemperatur in den Katalysator.

Ein weiterer wichtiger Parameter ist die Anzahl der Reaktoren. Je größer dieser Wert gewählt wird, desto genauer kann der Reaktionsverlauf über die Katalysatorlänge approximiert werden. Bei dem letzten Parameter handelt es sich um den Deckungsgrad. Dieser Wert definiert wie viel Prozent der Katalysatoroberfläche tatsächlich mit dem reaktiven Material benetzt sind.

Des Weiteren könnten noch Vorgaben bezüglich der Beschaffenheit der reaktiven Oberfläche des Katalysators sowie eine Dichte des Waschcoats eingegeben werden. Allerdings konnte das in dieser Version des Programms noch nicht funktionsfähig umgesetzt werden. Ebenso sind auch die daraus zu erwarteten Veränderungen relativ gering einzuschätzen.

Variable	Parameter
$d_{Kat}$	Katalysatordurchmesser
$l_{Kat}$	Katalysatorlänge
$epsi$	Zellen pro $inch^2$
<i>OFA</i>	Anteil der offenen Katalysatorquerschnittsfläche in Strömungsrichtung (Porosity)
$T_1$	Temperatur des Gemischs vor dem Verdichter
$p_1$	Druck vor dem Verdichter
$u$	Strömungsgeschwindigkeit des Gemischs vor dem Katalysator
$\lambda$	Verbrennungsluftverhältnis
$\Pi$	Druckverhältnis Verdichter
$\eta$	Isentroper Verdichtewirkungsgrad
$n_R$	Anzahl der Reaktoren
$De$	Deckungsgrad

**Tabelle 3.3:** Eingabeparameter für das Berechnungsprogramm

Nachfolgend werden die grundlegenden Berechnungsschritte des Simulationsprogramms erläutert. Da der *epsi*-Wert (Cells per square inch) nicht dem SI-Einheitensystem entspricht, wird er durch Gl. (3.1) in das metrische System übergeführt.



$$cp\text{sm} = \frac{cp\text{si}}{0,0254^2} \quad (3.1)$$

Die Querschnittsfläche  $A_{Kat}$  des zylindrischen Katalysators berechnet sich nach Gl. (3.2).

$$A_{Kat} = \frac{d_{Kat}^2 \pi}{4} \quad (3.2)$$

Multipliziert man diese Fläche mit dem *cp*si-Wert erhält man die Anzahl der Zellen des Katalysators (siehe Gl. (3.3)).

$$n_{Zelle} = A_{Kat} \text{cp}\text{sm} \quad (3.3)$$

In weiterer Folge wird unter Einbezug des Querschnittsflächenreduktionsfaktors *OFA* die Querschnittsfläche Gl. (3.4) und der Durchmesser Gl. (3.5) einer Katalysatorzelle berechnet.

$$A_{Zelle} = \frac{A_{Kat} \text{OFA}}{n_{Zelle}} = \frac{\text{OFA}}{\text{cp}\text{sm}} \quad (3.4)$$

$$d_{Zelle} = \sqrt{\frac{4 A_{Zelle}}{\pi}} \quad (3.5)$$

Mit dem Zellendurchmesser Gl. (3.5), der Zellenanzahl Gl. (3.3) und der Katalysatorquerschnittsfläche Gl. (3.2) kann der Proportionalitätsfaktor *k* Gl. (3.6) ermittelt werden. Dieser gibt das Verhältnis zwischen reaktiver Katalysatoroberfläche und Katalysatorvolumen an.

$$k = \frac{d_{Zelle} \pi n_{Zelle}}{A_{Kat}} \quad (3.6)$$

Mithilfe von Gl. (3.7) wird die Länge eines einzelnen Reaktors, durch Aufteilung der Gesamtlänge des Katalysators auf die Anzahl der Reaktoren, bestimmt

$$l_R = \frac{l_{Kat}}{n_R - 1} \quad (3.7)$$

und in weiterer Folge das für die Berechnung der Schleife benötigte Reaktorvolumen Gl. (3.8) und die dazugehörige reaktive Oberfläche Gl. (3.9) berechnet. Dabei kommt hier auch der Deckungsgrad *De* zum Einsatz.

$$V_{Reaktor} = A_{Kat} l_R \quad (3.8)$$

$$A_{reaktiv} = V_R k De \quad (3.9)$$

Im nächsten Schritt wird die Zusammensetzung des Brennstoff-Luft-Gemischs in Abhängigkeit des Verbrennungsluftverhältnisses definiert. Unter Verwendung der Globalreaktion (siehe Gl.

(2.3)) bei der Verbrennung von Wasserstoff mit Luft und unter Annahme, dass in der Luft 1 % Argon (Edelgas) enthalten ist, ergeben sich die Molanteile, bezogen auf 1 Mol des Brennstoffs, für die einzelnen Spezies wie folgt:

$$X_{H_2} = 1 \quad (3.10)$$

$$X_{O_2} = \frac{1}{2} \lambda \quad (3.11)$$

$$X_{N_2} = \frac{1}{2} \frac{0,78}{0,21} \lambda \quad (3.12)$$

$$X_{Ar} = \frac{1}{2} \frac{0,01}{0,21} \lambda \quad (3.13)$$

An dieser Stelle wird nun die erste CANTERA-Klasse *Gl. (3.14)* importiert. Dabei wird durch den Befehl "ct" das CANTERA-Modul aufgerufen. Die Funktion "Solution" kann zur Beschreibung von chemisch reagierenden Stoffgemischen verwendet werden. Diese können im festen, flüssigen oder gasförmigen Zustand vorliegen. Des Weiteren muss noch der verwendete Reaktionsmechanismus bestimmt werden. In diesem Fall wird ein Gas-Gemisch definiert, das alle Spezies aus dem "pti.combust.cti"-Reaktionsmechanismus, der hier mit der Variable "cti\_file" aufgerufen wird, enthalten kann. Optional könnte hier auch der originale GRI – 3.0-Reaktionsmechanismus verwendet werden.

$$\begin{aligned} gas &= ct.Solution(source, phase) \\ gas &= ct.Solution(cti\_file, 'gas') \end{aligned} \quad (3.14)$$

Das erstellte Gemisch muss nun noch initiiert werden. Zu diesem Zweck werden drei folgenden neun Parametern gewählt:

- Temperatur
- Druck
- Dichte
- spezifisches Volumen
- spezifische Enthalpie
- spezifische innere Energie
- spezifische Entropie
- Molanteile
- Massenanteile

In diesem Fall wird der thermodynamische Zustand des Gases durch die Eingabe der Temperatur, des Drucks und der molaren Zusammensetzung der Komponenten definiert (siehe *Gl. (3.15)*). Die Variable "specRatio" beschreibt dabei einen String, wo die Molanteile aus *Gl. (3.10)* – *Gl. (3.13)* zusammengefasst sind.

$$\begin{aligned} gas.TPX &= temperature, pressure, mole\ fraction \\ gas.TPX &= T_1, p_1, specRatio \end{aligned} \quad (3.15)$$

Nachdem das Gemisch im Zustand 1 (vor dem Verdichter) festgelegt wurde, können mit weiteren Befehlen einzelne thermodynamische Zustandsgrößen abgerufen werden. Mit *Gl. (3.16)* und *Gl.*

(3.17) werden beispielsweise die spezifischen molaren Wärmekapazitäten  $c_p$  und  $c_v$  ermittelt, die in weiterer Folge zur Berechnung des Isentropenexponenten  $\kappa$  Gl. (3.18) benötigt werden.

$$c_p = \text{gas}.cp \quad (3.16)$$

$$c_v = \text{gas}.cv \quad (3.17)$$

$$\kappa = \frac{c_p}{c_v} \quad (3.18)$$

Dieser wiederum wird zur Ermittlung der Temperatur in Zustand 2 (nach dem Verdichter) benötigt. Mit Gl. (3.19) wird, unter Verwendung des Druckverhältnisses  $\Pi$ , die Temperatur  $T_{2s}$  bei isentroper (reibungsfreier) Verdichtung im Zustand 2 errechnet.

$$T_{2s} = T_1 \Pi^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \quad (3.19)$$

Da der Kompressionsvorgang allerdings reibungsbehaftet ist, gilt es zusätzlich den inneren isentropen Wirkungsgrad zu berücksichtigen. Dieser setzt die spezifischen Verdichtungsarbeiten bei reibungsfreier gegenüber reibungsbehafteter Kompression ins Verhältnis. Die Temperatur am Austritt des Verdichters ergibt sich somit nach Gl. (3.20).

$$T_2 = \frac{T_{2s} - T_1}{\eta_{s-i}} + T_1 \quad (3.20)$$

Durch eine neuerliche Initiierung des Gas-Gemischs (Gl. (3.15)) mit der Temperatur  $T_2$  und dem Druck  $p_2$  wird der thermodynamische Zustand des Gases vor dem Katalysator bestimmt. Die Zusammensetzung des Gases bleibt dabei gleich. Für alle folgenden Berechnungen stehen nun die Zustandsgrößen unter den neu festgelegten Bedingungen zur Verfügung.

Mit der durch Gl. (3.21) ermittelten Dichte  $\rho$ , der Strömungsgeschwindigkeit  $u$  und der in Gl. (3.2) berechneten Katalysatorquerschnittsfläche  $A_{Kat}$  wird nun der zuströmende Massenstrom bestimmt (siehe Gl. (3.22)).

$$\rho = \text{gas}.density \quad (3.21)$$

$$\dot{m} = \rho A_{Kat} u \quad (3.22)$$

Ähnlich wie bei der Erstellung des Gemischs wird nun die reaktive Oberfläche erstellt (Gl. (3.23)). Dazu wird hier die Funktion "Interface" verwendet und wiederum der verwendete Reaktionsmechanismus eingelesen. Der Befehl "pt\_surf" verweist innerhalb des Reaktionsmechanismus auf Reaktionsgleichungen mit Platin. Zusätzlich wird der Phasenzustand der Stoffe benötigt.

$$\begin{aligned}
surf &= ct.Interface(source, root, phase) \\
surf &= ct.Interface(cti\_file, 'pt\_surf', [gas])
\end{aligned}
\tag{3.23}$$

Auch hier muss eine Initialisierung der Oberfläche festgelegt werden (Gl. (3.24)). Für die Temperatur wurde die Katalysatoreintrittstemperatur gewählt. Als Dichte sollte hier die Wash-Coat-Dichte verwendet werden. Allerdings führt eine Änderung dieses Parameters zu kleinen signifikanten Veränderungen in den Simulationsergebnissen. Wie bereits zu Beginn erwähnt, konnte diese Initiierung noch nicht einwandfrei umgesetzt werden. Für die Molanteile können neben den reaktiven Material noch Radikale für Wasserstoff und Sauerstoff bestimmt werden. Allerdings führt dies zu einem Abbruch der Simulation und somit wurde hier als Startwert reines Platin verwendet. Der Grund für den Abbruch ist wohl auf den Reaktionsmechanismus zurückzuführen.

$$\begin{aligned}
surf.TDX &= temperature, density, mole fraction \\
surf.TDX &= T_2, \rho_{Kat}, Pt
\end{aligned}
\tag{3.24}$$

In einem nächsten Schritt werden ein Vektor für den thermodynamischen Zustand des Gases (Gl. (3.25)) sowie die Zusammensetzung der Spezies (*cov*) an der reaktiven Oberfläche (Gl. (3.26)) für den ersten Reaktor abgespeichert.

$$\begin{aligned}
TDY &= gas.(temperature, density, mass fraction) \\
TDY &= gas.TDY
\end{aligned}
\tag{3.25}$$

$$\begin{aligned}
cov &= SpeziesZusammensetzung \\
cov &= surf.coverages
\end{aligned}
\tag{3.26}$$

Nachdem nun alle nötigen Größen für die Simulation des Katalysators bekannt sind, wird die Schleife für die Berechnung der einzelnen Reaktoren aufgebaut. Dazu werden zu Beginn das einströmende Gasgemisch (Gl. (3.27)) sowie die reaktive Oberfläche (Gl. (3.28) und (Gl. (3.29))) initialisiert. Im weiteren Verlauf der Simulation wird hier der Zustand des vorangegangenen Reaktors eingelesen und alle nachfolgenden Komponenten werden neu initialisiert und berechnet.

$$\begin{aligned}
gas.TDY &= temperature, density, massfraction \\
gas.TDY &= TDY
\end{aligned}
\tag{3.27}$$

Durch die Eingabe von  $TDY[0]$  wird der erste Wert des Vektors, in diesem Fall die Temperatur, aufgerufen.

$$\begin{aligned}
surf.TP &= temperature, pressure \\
surf.TP &= TDY[0], p_1
\end{aligned}
\tag{3.28}$$

$$surf.coverages = cov \quad (3.29)$$

Im nächsten Schritt werden der Reaktor, die Zu- und Abströmreservoirs, die Wand und die Strömungsregleinheiten erstellt.

Der Reaktor  $r$  wird dabei mit dem zuvor definierten Gas initiiert und es muss angegeben werden, ob die Energiegleichung gelöst werden soll (Siehe Gl. (3.30)).

$$r = ct.IdealGasReactor(gas, energie = 'on' ) \quad (3.30)$$

- 'off' → Temperatur bleibt fix
- 'on' → Temperatur kann sich ändern

Des Weiteren wird dem Reaktor, wie in Gl. (3.31) zu sehen, das entsprechende Volumen (Gl. (3.8)) zugeordnet.

$$r.volume = V_{Reaktor} \quad (3.31)$$

Ebenso wie der Reaktor werden auch die beiden Reservoirs für die Zuströmung (*upstream*) und die Abströmung (*downstream*) mit dem Gasgemisch initiiert. Weiters werden die Namen für die Reservoirs definiert (siehe Gl. (3.32) und Gl. (3.33)).

$$upstream = Reservoir(gas, name = 'upstream' ) \quad (3.32)$$

$$downstream = Reservoir(gas, name = 'downstream' ) \quad (3.33)$$

Die Zusammensetzung des Gases im Abströmreservoir ist dabei nicht von Bedeutung. Allerdings kann nur auf diesem Weg der regelgerechte Strömungsverlauf gewährleistet werden.

Um nun die reaktive Oberfläche zu implementieren, wird eine Wand (Gl. (3.34)) verwendet. Diese muss immer zwischen Reaktoren und/oder Reservoirs eingebaut werden. Bei dieser Anwendung wird die Wand zwischen dem Zuströmreservoir und dem Reaktor eingefügt. Des Weiteren muss für die Wand die entsprechende Oberflächengröße (Gl. (3.9)) zugeordnet werden. Durch den Befehl "kinetics" wird festgelegt, dass eine Reaktion nur auf der rechten Seite (Reaktorseite) der Wand, wo sich auch der Reaktor befindet, stattfinden kann. Dort wird die in Gl. (3.23) erstellte und in Gl. (3.28) bzw. Gl. (3.29) initiierte reaktive Oberfläche verwendet.

$$w = Wall(Zuströmung, Abströmung, Fläche, Reaktionsbereich) \\ w = Wall(upstream, r, A_{reaktiv}, kinetics = [None, surf]) \quad (3.34)$$

Auf die gleiche Weise wie die Wand, müssen auch die Strömungsregleinheiten zwischen Reservoirs bzw. Reaktoren eingebaut werden. Der Massenstromregler (Gl. (3.35)) wird dabei zwischen

dem Einströmreservoir und dem Reaktor platziert und regelt den in Gl. (3.22) bestimmten Massenstrom durch den Katalysator.

$$m = \text{MassFlowController}(\text{Zuströmung}, \text{Abströmung}, \text{Massenstrom})$$

$$m = \text{MassFlowController}(\text{upstream}, r, \dot{m}) \quad (3.35)$$

Das Ventil (Gl. (3.36)) ist zwischen dem Reaktor und dem Abströmreservoir positioniert und kann zur Regulierung des Drucks im Reaktor verwendet werden. Dabei beschreibt der Koeffizient  $K$ , inwiefern die Druckdifferenz den Massendurchfluss durch das Ventil beeinflusst. Je größer der Koeffizient gewählt wird, desto geringer ist der Druckunterschied. Bei Gasturbinen wird näherungsweise von einer isobaren Verbrennung ausgegangen und daher sollte der Druckgradient in Strömungsrichtung sehr gering bzw. negativ sein.

$$v = \text{Valve}(\text{Zuströmung}, \text{Abströmung}, \text{Koeffizient})$$

$$v = \text{Valve}(r, \text{downstream}, K = 1e - 1) \quad (3.36)$$

Nachdem alle CANTERA-Klassen initialisiert wurden, kann mit der Simulation begonnen werden. Dazu wird ein Reaktornetzwerk, wie in Gl. (3.37) zu sehen, aufgebaut. Da bei dieser Simulation nicht alle Reaktoren simultan berechnet werden, sondern ein Reaktor nach dem anderen, beinhaltet das Reaktornetzwerk nur den in Gl. (3.30) definierten Reaktor.

$$\text{sim} = \text{ReactorNet}([r]) \quad (3.37)$$

Darüber hinaus werden an dieser Stelle noch die maximal erlaubten Fehler ( $\text{sim.max\_err\_test\_fails} = 12$ ) sowie die relativen ( $\text{sim.rtol} = 1.0e - 9$ ) und absoluten ( $\text{sim.atol} = 1.0e - 21$ ) Toleranzen der Simulation definiert. Dabei handelt es sich um simulationsspezifische Parameter, welche bei einem ständigen fehlschlagen der Simulation geändert werden können.

Nachfolgend wird der Reaktor so lange simuliert bis das Abbruchkriterium ( $\text{Exit Ratio} = 1e - 8$ ) erfüllt ist oder die maximale Simulationszeit überschritten wird. Um das Abbruchkriterium zu erfüllen, muss das Verhältnis ( $\text{ratio}$ ) der chemischen Nettoproduktionsrate ( $\text{sdot}$ ) zur Summe der Produktionsrate ( $\text{cdot}$ ) und der Abbruchrate ( $\text{ddot}$ ) an der Katalysatoroberfläche geringer als der  $\text{Exit-Ratio}$  sein (siehe Gl. (3.40) und Gl. (3.40)). Das bedeutet, dass sich ein chemisches Gleichgewicht bei der vorgegebenen Reaktionszeit einstellt. Die dazu erforderlichen Produktionsdichten werden aus der Katalysatoroberfläche ausgelesen (siehe Gl. (3.40) – Gl. (3.42)).

$$\text{ratio} < \text{Exit Ratio} \quad (3.38)$$

$$\text{ratio} = \frac{\text{sdot}}{\text{cdot} + \text{ddot}} \quad (3.39)$$

$$\text{sdot} = \text{surf.get\_net\_production\_rates}(\text{surf}) \quad (3.40)$$

$$c_{dot} = surf.get\_creation\_rates(surf) \quad (3.41)$$

$$d_{dot} = surf.get\_destruction\_rates(surf) \quad (3.42)$$

In einem letzten Schritt werden der thermodynamische Zustand im Reaktor (Gl. (3.43)) und die Zusammensetzung der Spezies an der Katalysatoroberfläche (Gl. (3.44)) abgespeichert. Diese dienen als Startwerte für den nächsten Reaktor.

$$TDY = r.thermo(temperature, density, mass\ fraction)$$

$$TDY = r.thermo.TDY \quad (3.43)$$

$$cov = SpeziesZusammensetzung$$

$$cov = surf.coverages \quad (3.44)$$

Die gesamten Daten der Simulation werden abgespeichert und in einem eigenen PYTHON-Skript ausgewertet.

### 3.2.3 Resultate Modell 1

Die Berechnungen sowie die Auswertung der Resultate wurde durch den Verfasser dieser Arbeit durchgeführt. Um das Programm bei verschiedenen Betriebspunkten vergleichen zu können, wurden lediglich zwei Eingabeparameter, die Katalysatorlänge und die Strömungsgeschwindigkeit, variiert. Ein weiterer Parameter welcher des Öfteren in der einschlägigen Literatur verwendet wird ist die Raumgeschwindigkeit (Gl. (3.45)). Diese beschreibt das Verhältnis des durch den Katalysator strömenden Volumenstroms ( $\dot{V}$ ) zum Katalysatorvolumen ( $V_{Kat}$ ) bzw. das Verhältnis der Strömungsgeschwindigkeit zur Katalysatorlänge.

$$v_{Raum} = \frac{\dot{V}}{V_{Kat}} = \frac{v}{l_{Kat}} \quad (3.45)$$

Durch die Verwendung dieses Parameters kann, wie in Tab. 3.4 zu sehen, eine Matrix mit verschiedenen Betriebspunkten erstellt werden. In diesem Fall werden die unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten durch vorgegebene Raumgeschwindigkeiten und Katalysatorlängen bestimmt.

Geschwindigkeit [m/s]	Raumgeschwindigkeit [1/h]				
Katalysatorlänge [m]	125.000	250.000	500.000	1.000.000	2.000.000
0,05	1,74	3,47	6,94	13,89	27,78
0,1	3,47	6,94	13,89	27,78	55,56
0,2	6,94	13,89	27,78	55,56	111,11
0,4	13,89	27,78	55,56	111,11	222,22
0,8	27,78	55,56	111,11	222,22	444,44

Tabelle 3.4: Variable Eingabeparameter

Bei der nachfolgenden Auswertung werden die einzelnen Betriebspunkte miteinander verglichen, wobei jeweils einer der drei Parameter konstant gehalten wird.

- gelb: konstante Katalysatorlänge
- blau: konstante Strömungsgeschwindigkeit
- orange: konstante Raumgeschwindigkeit

Des Weiteren wurden für die Simulationen folgende fixe Parameter gewählt (siehe *Tab. 3.5*). Dabei hat die Wahl des Durchmessers keinen maßgeblichen Einfluss auf die Simulation, da sowohl die Geometrie (Katalysatorvolumen, reaktive Oberfläche) als auch der Volumenstrom, Funktionen dieses Parameters sind. Durch den *psi*-Wert, den *OFA*-Wert und die Flächendeckung kann die reaktive Oberfläche beeinflusst werden. Diese wurden hier anhand der Daten der Firma Heraeus (siehe *Kap. 3.3*) ausgewählt. Der Druck und die Temperatur vor dem Verdichter wurden bei normatmosphärischen Bedingungen (ISA: 1,01325 bar und 15 °C) gewählt. Das Druckverhältnis und die damit geregelte Temperatur am Katalysatoreintritt wurden so gewählt, dass eine chemische Reaktion an der Katalysatorwand stattfindet. Bei einem geringeren Wert konnte die nötige Aktivierungsenergie nicht erreicht werden. Zudem ist das Simulationsmodell derzeit nur bei mageren Bedingungen funktionsfähig. Aus diesem Grund wurde daher ein Gemisch mit entsprechendem Luftüberschuss gewählt. Durch eine Reaktoranzahl von 200 Stück, was bei einer Katalysatorlänge von 10 cm einer Reaktorlänge von einem 1/2 mm entspricht, sollen die Verläufe äußerst genau abgebildet werden.

Variable	Wert
$d_{Kat}$	25 mm
<i>psi</i>	200
<i>OFA</i>	92 %
$T_1$	288,15 K
$p_1$	1,01325 bar

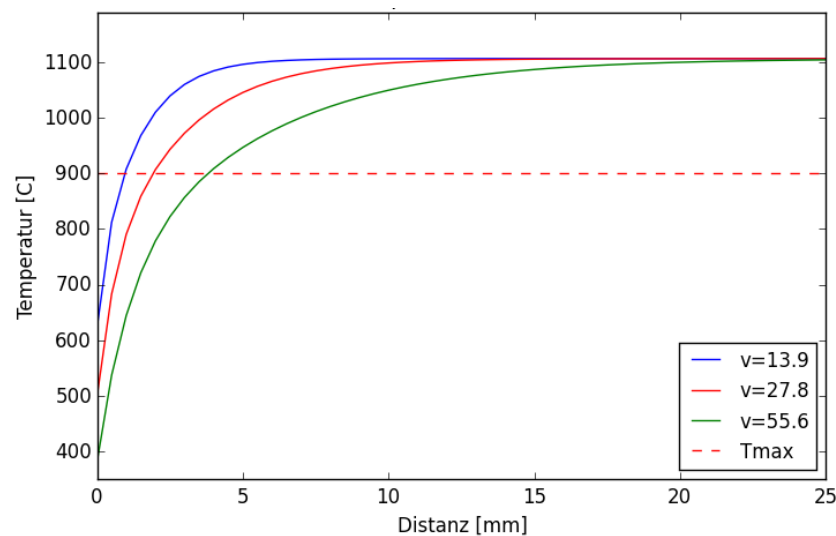
Variable	Wert
$\lambda$	3
$\Pi$	3
$\eta$	80 %
$n_{Reaktor}$	200
$D$	100%

Tabelle 3.5: Konstante Eingabeparameter für das Berechnungsprogramm



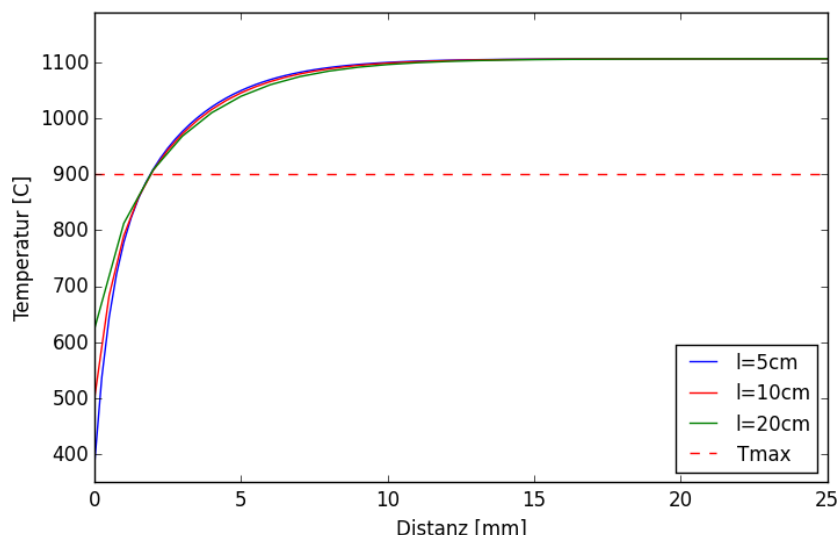
Wie in den folgenden Abbildungen zu sehen, war das Resultat der ersten Simulationen, dass die Reaktionen sehr schnell ablaufen. Die ersten drei Graphen zeigen dabei die Temperaturverläufe entlang des Katalysators, welche nach ca. 20 mm keine Änderungen mehr aufweisen. Daraus zieht man den Schluss, dass ab dieser Position die adiabate Verbrennungstemperatur erreicht und der gesamte Brennstoff umgesetzt ist. Die durch die geringe  $Le$ -Zahl des Wasserstoffs zu erwartenden superadiabaten Verbrennungstemperaturen können hier nicht festgestellt werden. Dies ist auf die Verwendung der Idealen-Gas-Reaktoren im Berechnungsmodell zurückzuführen. Durch die rot strichlierte Linie wird die im Katalysator maximal erlaubte Temperatur von 900 °C angezeigt. Diese ist auf die maximale empfohlene Einsatztemperatur des Platins (*Kap. 2.3.2.3*) zurückzuführen.

In *Abb. 3.2* sind die Verläufe der Temperatur bei einer konstanten Katalysatorlänge von 10 cm dargestellt. Variabel sind somit die Geschwindigkeit und die Raumgeschwindigkeit. Wie zu erkennen ist, steigt mit zunehmender Geschwindigkeit auch die Distanz, ab welcher die adiabate Verbrennungstemperatur erreicht wird. Dies kann mit der verkürzten Reaktionszeit erklärt werden. Auffallend ist auch, dass die Temperaturen in den ersten Reaktoren von 400 °C bis 650 °C reichen. Dies kann wiederum auf die Reaktionszeit zurückgeführt werden. Bei konstanter Gesamtlänge des Katalysators haben auch die einzelnen Unterreaktoren eine konstante Länge. Daher kann bei einer geringeren Geschwindigkeit in einem Unterreaktor eine größere Menge des Brennstoffs umgesetzt werden, was wiederum zu einer höheren Temperatur führt.



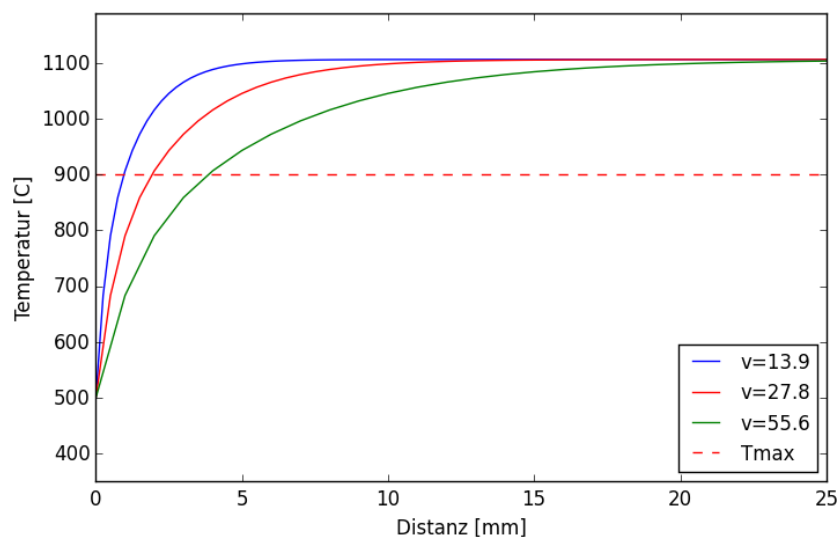
**Abbildung 3.2:** Temperaturverläufe bei konstanter Katalysatorlänge (10 cm)

*Abb. 3.3* zeigt die Verläufe bei einer konstanten Geschwindigkeit von 27,8 m/s. Hier sind bei nahe keine Unterschiede zwischen den einzelnen Betriebspunkten zu erkennen. Aufgrund der verschiedenen Katalysatorlängen ändern sich allerdings, bei konstanter Reaktoranzahl, die Reaktortlängen und die Katalysatoren werden, bezogen auf einen gleich langen Katalysatorabschnitt, unterschiedlich genau approximiert. Dadurch kommt es auch hier zu Temperaturunterschieden im Bereich des Katalysatoreintritts.



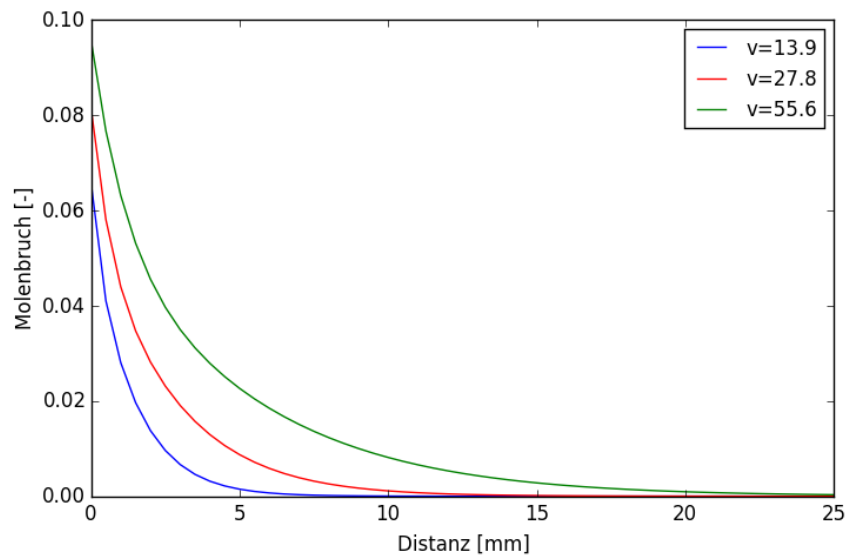
**Abbildung 3.3:** Temperaturverläufe bei konstanter Strömungsgeschwindigkeit (27,8 m/s)

In Abb. 3.4 sind die Temperaturen bei einer einheitlichen Raumgeschwindigkeit zu sehen. Auffallend ist, dass die Verläufe beinahe mit jenen aus dem ersten Graphen identisch sind. Durch die unterschiedlichen Reaktorlängen wird hier allerdings jener Katalysator mit der geringsten Strömungsgeschwindigkeit am detailliertesten angenähert und es ist, entgegen den Resultaten aus der ersten Abbildung, zu sehen, dass auch hier am Eintritt des Katalysators niedrigere Temperaturen herrschen. Allgemein kann festgestellt werden, dass sich die Verläufe beinahe nur entsprechend der Geschwindigkeiten ändern und dies somit der ausschlaggebende Parameter ist.



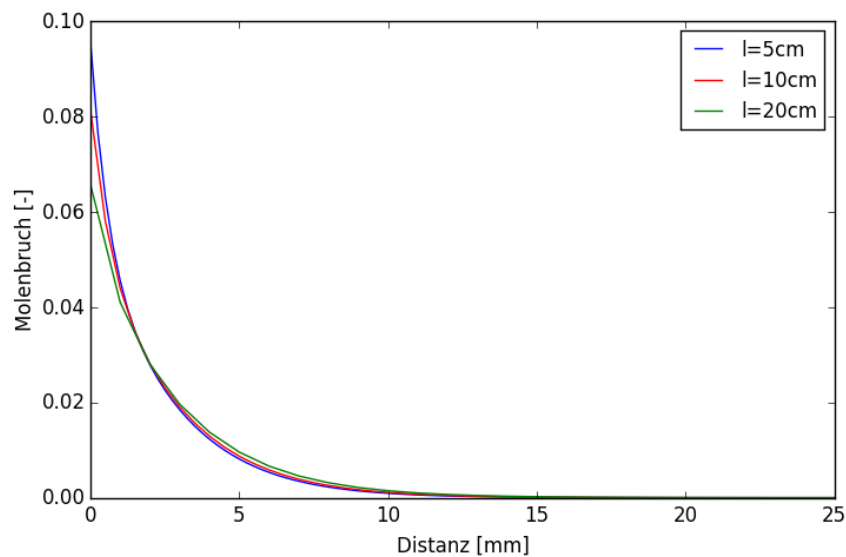
**Abbildung 3.4:** Temperaturverläufe bei konstanter Raumgeschwindigkeit ( $10^6$  1/h)

In Abb. 3.5 bis Abb. 3.7 sind die Verläufe des Wasserstoff-Molenbruchs für die einzelnen Betriebspunkte zu sehen. Wie bei den Temperaturverläufen wird auch hier jeweils ein Parameter konstant gehalten. In Abb. 3.5 die Katalysatorlänge, in Abb. 3.6 die Geschwindigkeit und in Abb. 3.7 die Raumgeschwindigkeit.



**Abbildung 3.5:** H<sub>2</sub>-Molenbruch bei konstanter Katalysatorlänge (10 cm)

Vergleicht man nun die Verläufe der Temperaturen mit jenen der Molenbrüche, ist ersichtlich, dass beim Erreichen des Maximalwerts der Temperatur der Wasserstoffanteil im Gemisch null wird und somit der gesamte Brennstoff umgesetzt werden kann. Ebenso werden in diesen Verläufen die Erkenntnisse aus den Temperaturverläufen widergespiegelt. Auch hier sind je nach der Genauigkeit der Approximation, vor allem am Katalysatoreintritt, Unterschiede ersichtlich.



**Abbildung 3.6:** H<sub>2</sub>-Molenbruch bei konstanter Strömungsgeschwindigkeit (27,8 m/s)

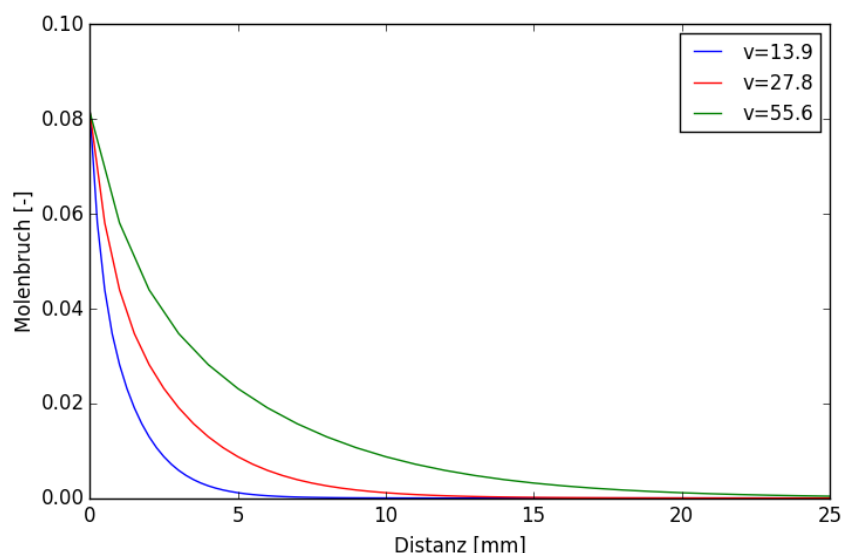


Abbildung 3.7: H<sub>2</sub>-Molenbruch bei konstanter Raumgeschwindigkeit ( $10^6$  1/h)

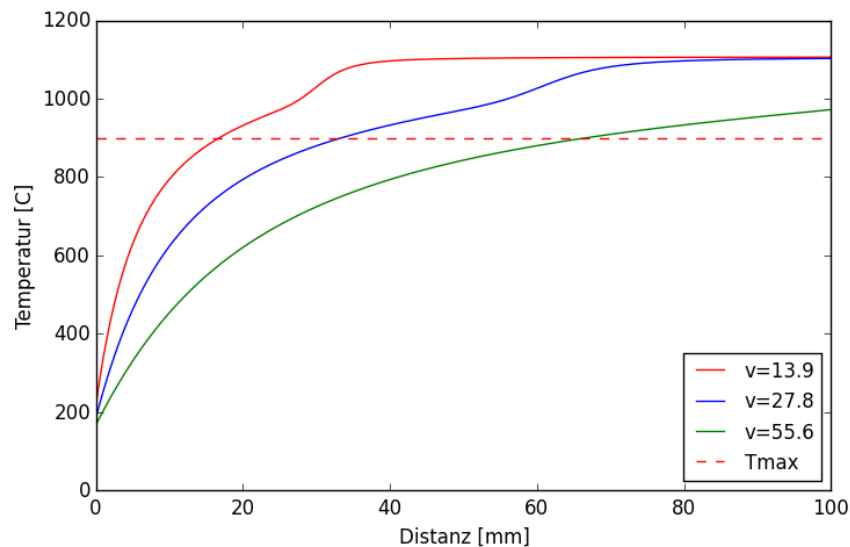
Wie diesen Ergebnissen zu entnehmen ist, laufen die Reaktionen innerhalb einer sehr kurzen Strecke ab. Je nach Strömungsgeschwindigkeit ist bereits nach ca. 5 – 20 mm der gesamte Brennstoff umgesetzt. Verglichen mit den Experimenten von Ozawa[21], wo Katalysatoren mit einer Länge von 100 mm und eine mittlere Strömungsgeschwindigkeit von ca. 27 m/s verwendet wurden, wäre hier die Katalysatorlänge bei weitem überdimensioniert. Auch bei Kuper[15] wurden die Experimente bei Strömungsgeschwindigkeiten zwischen 11 – 30 m/s durchgeführt. Leider waren hier die Längen der verwendeten Katalysatoren nicht angegeben. Durch eine Abschätzung der Skizze kann allerdings in etwa auf eine Länge von 100 mm geschlossen werden. Bei den erwähnten Experimenten wurden jedoch Erdgas bzw. Methan als Brennstoff verwendet, welche im Vergleich zu Wasserstoff eine geringere Brenngeschwindigkeit und eine größere *Le*-Zahl aufweisen. Die Reaktion wird daher beim Wasserstoff schneller ablaufen.

Nichtsdestotrotz, läuft bei den Simulationen die Reaktion extrem schnell ab und in weiterer Folge wurde, durch das Verändern von zwei Parametern, die Katalysatoroberfläche so beeinflusst, dass die Reaktionsrate gemindert wird. Bei den veränderten Parametern handelt es sich um den *OFA*-Wert und um den Deckungsgrad, wie in Tab. 3.6 zu sehen ist. Der *OFA*-Wert des Katalysators wurde auf 30 % gesenkt. Das entspricht jenem Wert, der auch bei dem Original-Code von CANTERA verwendet wurde. Darüber hinaus wurde auch der Deckungsgrad auf 30 % gesenkt. Dies basiert auf der Annahme, dass nicht die gesamte Katalysatoroberfläche mit Platin überzogen ist. Die restlichen Parameter wurden nicht verändert.

Variable	Wert
<i>OFA</i>	30 %
<i>De</i>	30 %

Tabelle 3.6: Geänderte konstante Eingabeparameter für das Berechnungsprogramm

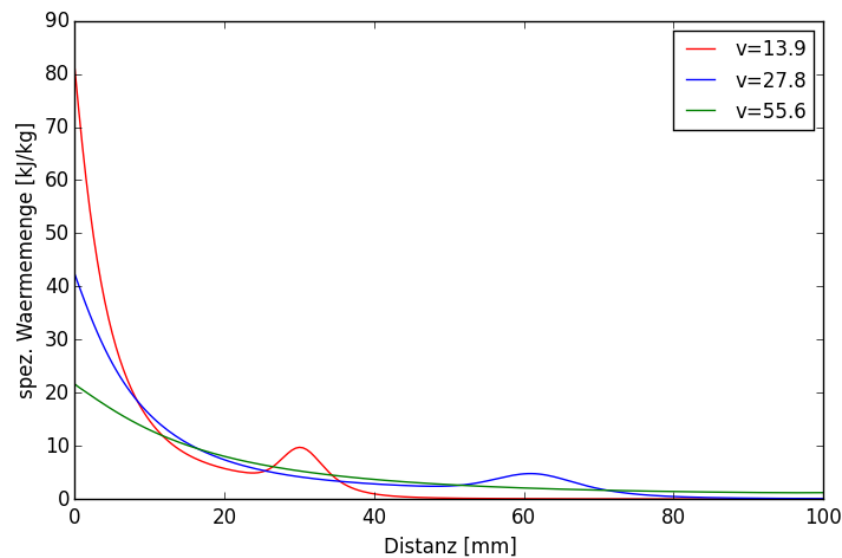
Durch die geänderten Parameter ergeben sich folgende Resultate. In *Abb. 3.8* sind, wie bereits in *Abb. 3.2*, die Temperaturverläufe bei einer konstanten Katalysatorlänge und bei variabler Strömungsgeschwindigkeit ausgewiesen. Durch die reduzierte katalytisch aktive Oberfläche wird für die Umsetzung des Brennstoffs, verglichen mit den ersten Ergebnissen, eine längere Katalysatorstrecke benötigt. Bei einer Geschwindigkeit von 55,6 m/s ist nach einer Länge von 100 mm die adiabate Verbrennungstemperatur noch nicht erreicht und somit noch nicht der gesamte Brennstoff umgesetzt. Die maximal erlaubte Temperatur im Katalysator wird allerdings schon bei ca. 65 mm überschritten. Bei den beiden anderen Verläufen sind Ausschläge zu sehen. Diese sind auf den Reaktionsmechanismus zurückzuführen. Auch hier wird die maximal erlaubte Temperatur sehr rasch erreicht.



**Abbildung 3.8:** Temperaturverläufe bei konstanter Katalysatorlänge (10 cm)

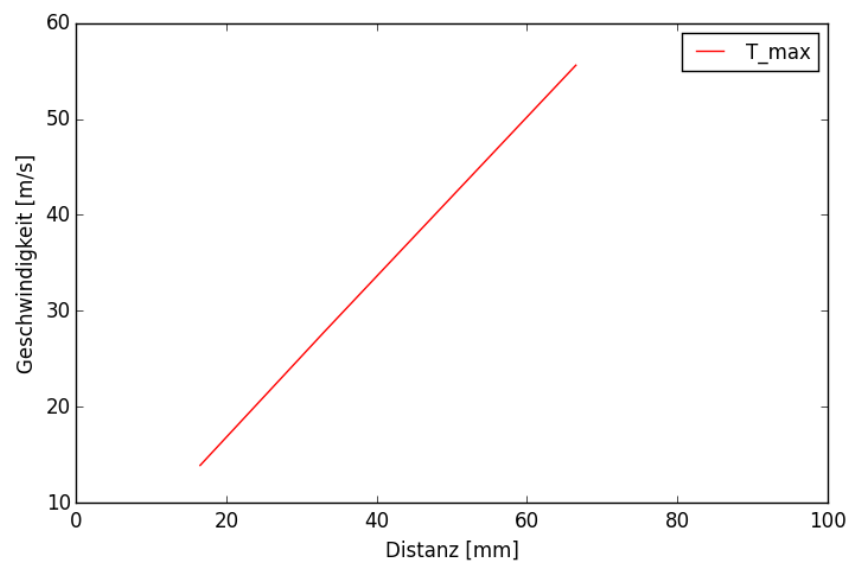
Die Ergebnisse bei einer konstanten Geschwindigkeit bzw. einer konstanten Raumgeschwindigkeit unterscheiden sich ebenfalls nur durch die verringerte Reaktivität zu den ersten Simulationen. Diese Aussage trifft auch auf die Molenbrüche zu. Aus diesem Grund werden diese Resultate an dieser Stelle nicht mehr näher erläutert.

In weiterer Folge wurde für diese Simulation noch die umgesetzte Wärmemenge entlang des Katalysators ausgewertet (siehe *Abb. 3.9*). Diese stimmen mit den Temperaturverläufen überein. Im Bereich des Katalysatoreintritts, wo die Temperaturen sehr rasch ansteigen, wird die größte Wärmemenge umgesetzt. Ebenso sind hier die Schwankungen wie in den Temperaturverläufen ersichtlich.



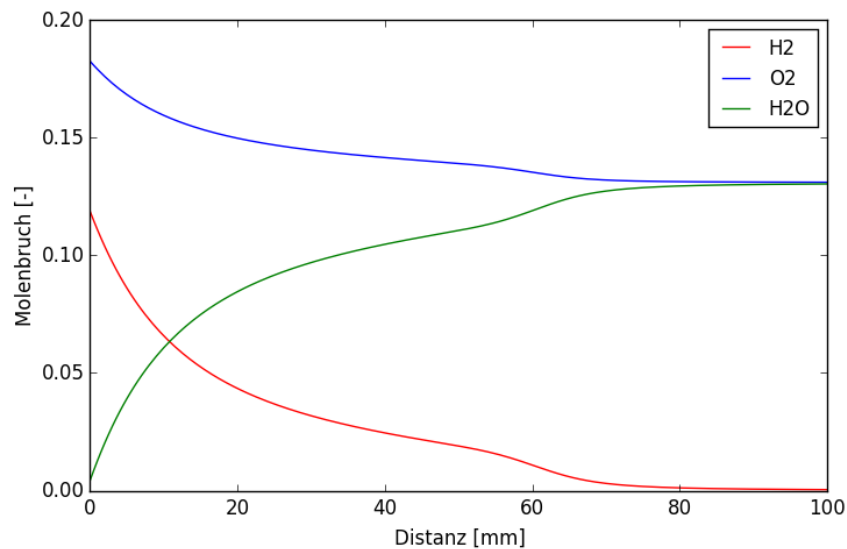
**Abbildung 3.9:** Umgesetzte Wärmemenge bei konstanter Katalysatorlänge (10 cm)

In einer weiteren Auswertung wurde das Erreichen der maximal erlaubten Temperatur von 900 °C in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit ermittelt. Durch den linearen Verlauf in *Abb. 3.10* ist ersichtlich, dass die Reaktion proportional zur Geschwindigkeit abläuft.



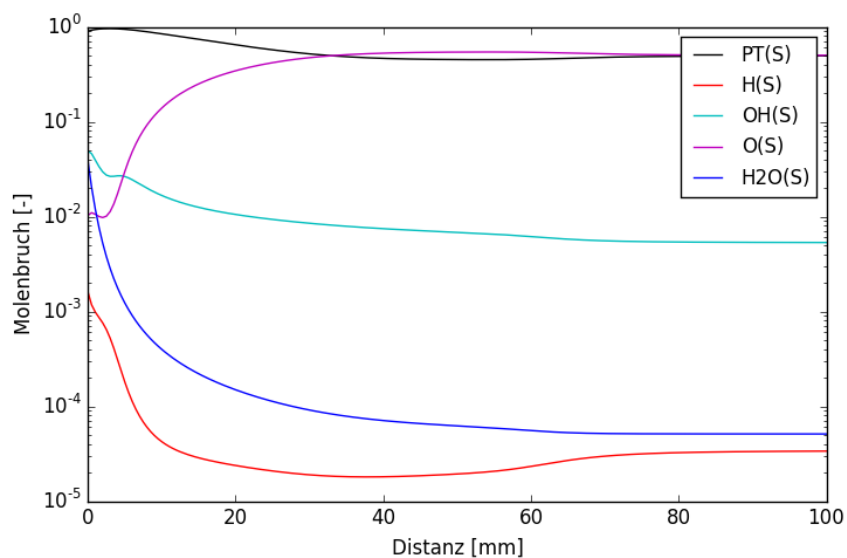
**Abbildung 3.10:** Erreichung der max. Temperatur von 900 °C in Abhängigkeit der Strömungsgeschwindigkeit

Abschließend wurden noch die Speziesverläufe bei einer Strömungsgeschwindigkeit von 27,8 m/s entlang des Katalysators ausgewertet. In *Abb. 3.11* sind die Verläufe der Hauptspezies ( $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ) im Gas ausgewiesen. Hier ist sehr schön zu sehen, wie Wasserstoff und Sauerstoff verbraucht und zu Wasserdampf oxidiert werden. Ebenso sind wiederum die Schwankungen in den Verläufen ersichtlich. Durch den Luftüberschuss ( $\lambda = 3$ ) bleibt nach der Umsetzung des Brennstoffs noch der restliche Sauerstoff im Gemisch enthalten.



**Abbildung 3.11:** Wasserstoff-, Sauerstoff- und Wasserdampfmolenbrüche im Gasgemisch bei  $v = 27,8 \text{ m/s}$

Abb. 3.12 zeigt die Zusammensetzung der Spezies an der Katalysatoroberfläche. Im Berechnungsprogramm wird die Oberfläche zu Beginn nur mit Platin initiiert. Wie an den Verläufen zu sehen ist, werden daher am Katalysatoreintritt schlagartig die Wasserstoff- und Sauerstoffatome adsorbiert und in weiterer Folge in  $OH$ -Radikalen und Wasserdampf umgewandelt. Im Verlauf durch den Katalysator sinkt der Anteil des unverbrannten Wasserstoffs im Gemisch und es kann daher auch weniger adsorbiert werden. Da durch den Luftüberschuss eine große Menge an Sauerstoff vorhanden ist, steigt dieser Anteil entlang des Katalysators. Die Menge an produziertem Wasserdampf ist natürlich von dem Wasserstoffanteil abhängig und nimmt daher in Richtung Katalysatorende ab.



**Abbildung 3.12:** Spezieszusammensetzung an der Katalysatoroberfläche bei  $v = 27,8 \text{ m/s}$

### 3.2.4 Validierung mit anderen Programmen

Um eine Aussage über die Funktionalität und die Richtigkeit der erhaltenen Ergebnisse treffen zu können, wurde das bereits präsentierte erste Simulationsprogramm (Modell 1) noch mit zwei weiteren Programmen verglichen. Bei dem ersten Modell werden alle Subreaktoren nacheinander berechnet und die Ergebnisse zwischendurch abgespeichert. Da es allerdings sein kann, dass der nachfolgende Reaktor auch den vorangehenden beeinflusst, wurde das erste Programm dahingehend abgeändert, dass alle Reaktoren simultan gelöst werden. Eine Version kam dabei wiederum durch die Firma SES-Tec zu Stande und eine weitere wurde von Herrn Dr.-Ing. Oliver Borm und dem Verfasser dieser Masterarbeit entwickelt.

#### 3.2.4.1 Modell 2

Modell 2 wurde, wie bereits Modell 1 (siehe *Kap. 3.2.2*), von der Firma SES-Tec erarbeitet. Der maßgebliche Unterschied zum Vorgängermodell liegt darin, dass die gesamte Kette an Subreaktoren gleichzeitig berechnet wird. Eine weitere wesentliche Veränderung besteht in der Verbindung der einzelnen Reaktoren und Reservoirs. Beim ersten Modell wird vor dem Eintritt in den Katalysator ein homogenes Brennstoff-Luft-Gemisch erzeugt. Hingegen werden bei Modell 2 der Brennstoff- sowie der Luftmassenstrom getrennt aus einem Reservoir in den ersten Reaktor geführt. Dies wird durch zwei separate Massenstromregler gewährleistet. In weiterer Folge sind die einzelnen Reaktoren mit Druckreglern verbunden, wobei hier das Gemisch nicht zwischendurch in einem Reservoir zwischengespeichert wird. Die Druckregler sind mit den Massenstromreglern verbunden, wodurch die Strömung durch den Katalysator kontrolliert wird. Der letzte Reaktor ist abschließend über ein Ventil mit einem Abgasreservoir verbunden. Als dritte Änderung wird bei dieser Simulation das Reaktornetzwerk nicht mit dem Abbruchkriterium der Nettoproduktionsraten berechnet. Hier wird zu Beginn der Endzustand der Reaktion nach einer Zeit von zwei Sekunden ermittelt. In weiterer Folge wird der Verlauf bis zu diesem Endzustand so lange interpoliert, bis sich keine Änderung mehr ergibt. Abschließend wird auf die Zustände in den einzelnen Reaktoren, welche eine fixe Position in axialer Strömungsrichtung besitzen, zurückgerechnet.

#### Eigenschaften Modell 2:

- Simultane Berechnung der Subreaktoren
- Separate Zuströmung von Brennstoff und Luft in den ersten Reaktor
- Die Strömung wird mit Druck- und Massenstromreglern sowie mit einem Ventil gesteuert
- Geänderte Berechnung der Zustände in den einzelnen Reaktoren

#### 3.2.4.2 Modell 3

Modell 3 wurde von Herrn Dr.-Ing. Oliver Borm und dem Verfasser dieser Masterarbeit entwickelt. Wie bei Modell 2 wird auch hier die gesamte Reaktorkette gleichzeitig berechnet. Die Einbringung des Brennstoffs und der Verbrennungsluft bleibt hier, bezogen auf das erste Modell,



allerdings unverändert. Das bedeutet, es wird wiederum ein vordefiniertes Gasgemisch aus einem Reservoir in die Katalysatorstrecke eingebracht. Der Massenstrom im ersten Reaktor wird durch einen Massenstromregler vorgegeben. Die nachfolgenden Reaktoren sind, wie bei Modell 2, direkt über einen Druckregler verbunden. Abschließend strömt das Gemisch über ein Ventil in das Abgasreservoir. Die Berechnung des Reaktornetzwerkes bleibt gegenüber dem ersten Modell ebenso identisch. Nur das nun alle Reaktoren simultan berechnet werden.

### Eigenschaften Modell 3:

- Simultane Berechnung der Subreaktoren
- Homogenes Brennstoff-Luft-Gemisch vor dem ersten Reaktor
- Die Strömung wird mit Druck- und Massenstromreglern sowie mit einem Ventil gesteuert. Berechnung des Reaktornetzwerkes wie bei Modell 1

#### 3.2.4.3 Resultate der Validierung

Die Berechnungen und die Auswertungen der Ergebnisse wurden wiederum durch den Autor durchgeführt. Durch die simultane Berechnung der Reaktoren entsteht ein erhöhter numerischer Aufwand, was im Falle der neuen Modelle zu einer unzumutbaren Simulationszeit bzw. meistens zu einem Abbruch der Berechnung führte. Schlussendlich konnten mit Modell 2 und 3 nur Simulationen mit einer Reaktoranzahl von maximal sieben Reaktoren erfolgreich durchgeführt werden. Zusätzlich musste das Reaktorvolumen, anstelle des berechneten Werts  $Gl. (3.8)$ , eigens initialisiert werden. Andernfalls wären mit Modell 2 keinerlei Berechnungen möglich gewesen. Um zumindest einen Vergleich des Berechnungsablaufs zu erhalten, wurden alle drei Programme mit einheitlichen Parametern initialisiert. Auf die verwendeten Parameter wird hier nicht näher eingegangen, da die Daten durch das veränderte Reaktorvolumen nicht zur qualitativen Auswertung der Simulationen, sondern nur zum Vergleich der einzelnen Modelle, herangezogen werden können.

In *Abb. 3.13* sind die Temperatur- und Druckverläufe der einzelnen Modelle dargestellt. Wie zu sehen ist, sind die Ergebnisse für die Temperatur des ersten und des dritten Modells völlig identisch. Bei Modell 2 ergeben sich in den ersten zwei Reaktoren, gegenüber den anderen Modellen, höhere Temperaturen. Die Differenz beträgt in Reaktor 1 allerdings nur ca. 10 °C und ist im zweiten beinahe nicht mehr erkenntlich. Dieser Unterschied ist wohl auf die unterschiedlichen Berechnungsabläufe in den Reaktornetzwerken zurückzuführen. Ab dem dritten Reaktor ist bei allen Modellen der gesamte Brennstoff umgesetzt und somit die adiabate Verbrennungstemperatur ersichtlich. Bei den Druckverläufen sind zwischen allen Modellen Unterschiede zu erkennen. Auffallend ist, dass sich bei Modell 1 ein Druckanstieg in Strömungsrichtung ergibt. Bei Modell 2 und 3 wird zur Strömungsregulierung, zusätzlich zum Massenstromregler und dem Ventil, noch ein Druckregler verwendet. Dadurch ist dieses Verhalten zu erklären. Alle Druckdifferenzen befinden sich innerhalb eines Bereichs von nur 0,3 Pa, was bei realen Verhältnisse zu vernachlässigen ist.

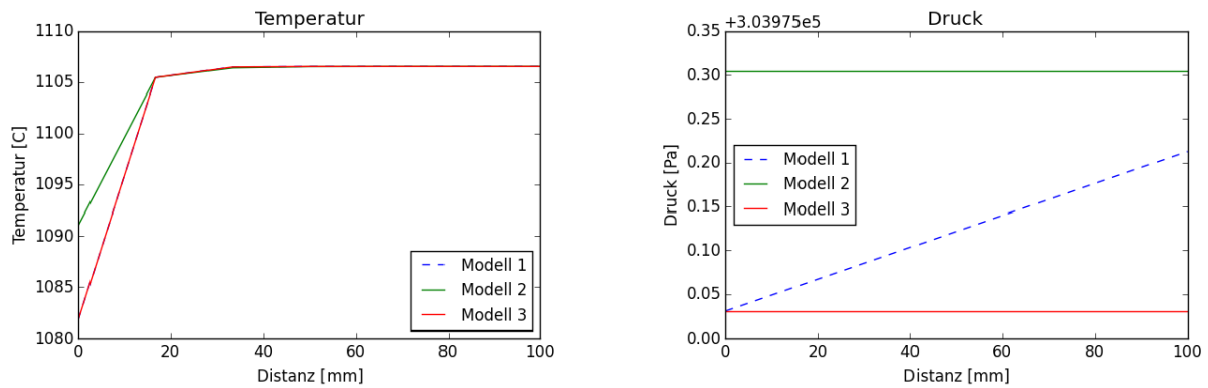


Abbildung 3.13: Temperatur und Druck der verschiedenen Modelle

In Abb. 3.14 sind die Verläufe der Molenbrüche für Wasserstoff und Wasser angeführt. Hier ist das gleiche Verhalten wie bei den Temperaturverläufen zu sehen. Nur Modell 2 unterscheidet sich geringfügig von den anderen Modellen.

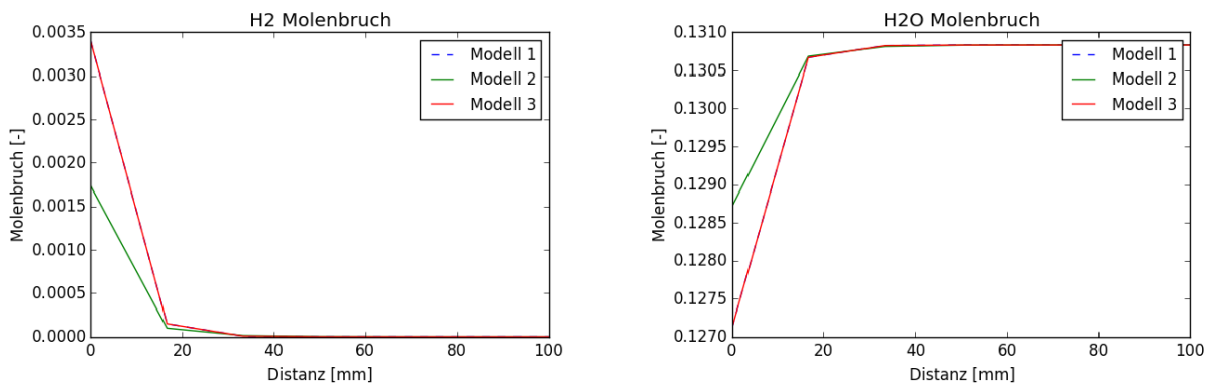


Abbildung 3.14: Wasserstoffverbrauch und Wasserproduktion der verschiedenen Modelle

Um zu gewährleisten, dass in allen Modellen die gleichen Randbedingungen herrschen, sind in Abb. 3.15 die Massenströme sowie das Volumen der einzelnen Reaktoren abgebildet. Hier sind keinerlei Abweichungen zwischen den verschiedenen Modellen ersichtlich.

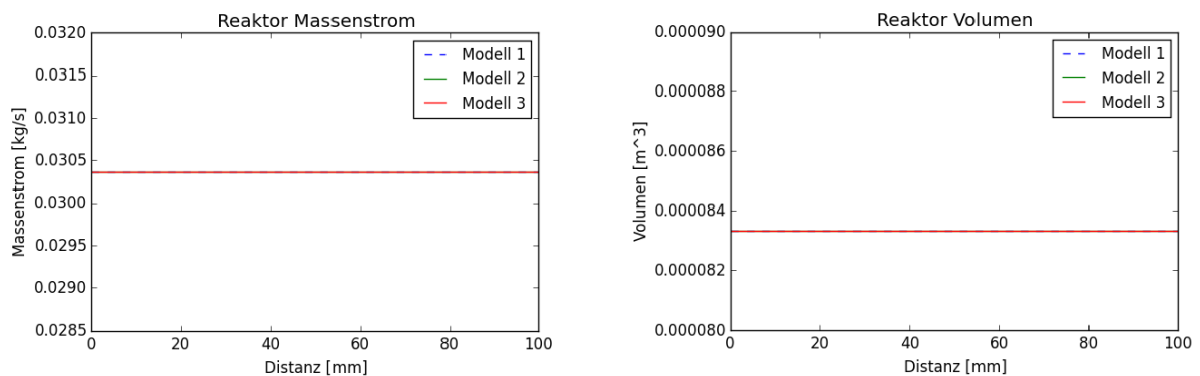


Abbildung 3.15: Reaktorvolumen und Massenströme der verschiedenen Modelle

Der Vergleich wurde zudem bei einem anderen Betriebspunkt getestet. Auch hier war nur eine geringe Abweichung der Temperatur und folglich auch der Molenbrüche des zweiten Modells ersichtlich. Daraus kann man schließen, dass sich die Programme auch bei allen weiteren Betriebspunkten in dieser Weise verhalten werden.

Auf Grund dieser Ergebnisse ist ersichtlich, dass Modell 1, auch wenn die einzelnen Reaktoren nicht simultan gelöst werden, verlässliche Ergebnisse liefert. Einzige Schwachstelle bleibt der ansteigende Druck in Strömungsrichtung, welcher jedoch aufgrund der geringen Größe vernachlässigt werden kann.

### 3.2.5 Fazit

Die ermittelten Resultate zeigen eine überaus schnelle katalytische Reaktion des Wasserstoff-Luft-Gemischs. Der verwendete Reaktionsmechanismus, welcher für Methan ausgelegt ist, könnte mit ein Grund für dieses Verhalten sein. Für weitere Simulationen sollte dieser für die Reaktion mit reinem Wasserstoff angepasst werden. Weiters ist ersichtlich, dass der Ablauf der katalytischen Reaktion vorwiegend eine Funktion der Strömungsgeschwindigkeit ist und sich durch die Änderung der Raumgeschwindigkeit und der Länge kaum Unterschiede ergeben. Vergleicht man die Resultate aus *Abb. 3.2* und *Abb. 3.8* ist ersichtlich, dass durch die Änderung der katalytischen Oberfläche natürlich ein starker Einfluss auf die Reaktion ausgeübt werden kann. Ein Nachteil dieser Simulation ist, dass hier das Strömungsverhalten im Katalysator nicht mitberücksichtigt wird und somit das superadiabate Verhalten von Wasserstoff nicht in Erscheinung tritt. Des Weiteren wurde hier eine minimale Zündtemperatur von ca. 200 °C festgestellt. Bei den zukünftigen Experimenten werden hier geringere Werte, möglicherweise bereits bei Umgebungstemperatur, erhofft.

Inwiefern diese Ergebnisse die realen Bedingungen der katalytischen Verbrennung von Wasserstoff wiedergeben, kann erst nach Auswertung der ersten Experimente analysiert werden. Zusammengefasst kann aus den ermittelten Ergebnissen geschlossen werden, dass die Reaktion mit Wasserstoff sehr schnell ablaufen kann und somit die Katalysatorlängen eher kurz gewählt werden sollten.

## 3.3 Informationen und Lieferprogramm des Katalysatorherstellers

Um geeignete Katalysatoren für den Prüfstand zu erhalten, wurde mit mehreren Herstellern Kontakt aufgenommen und die Rahmenbedingungen der geplanten Experimente diskutiert. In Anbetracht der genannten Anforderungen hat sich die Firma Heraeus als geeigneter Lieferant herauskristallisiert.

HERAEUS	Material	Bemerkung
Katalysatorträger	Metall	1000 – 1050 °C
	Keramik	1400 °C
Washcoat	$Al_2O_3$	650 – 750 °C
	$\gamma - Al_2O_3$	800 – 850 °C
	$\alpha - Al_2O_3$	> 1000 °C
Reaktives Material	Palladium <i>Pd</i>	50 – 300 g/ft <sup>3</sup>
	Platin <i>Pt</i>	
	Rhodium <i>Rh</i>	

Tabelle 3.7: Katalysatormaterialien der Firma Heraeus

In Tab. 3.7 ist das mögliche Lieferprogramm für dieses Projekt, der katalytischen Umsetzung von Wasserstoff, angeführt. Die Katalysatorträger sind in metallischer oder keramischer Ausführung erhältlich. Der wesentliche Unterschied zwischen diesen Materialien liegt, wie bereit in Kap. 2.3.2.1 beschrieben, in der maximal erlaubten Einsatztemperatur. In Tab. 3.8 sind zudem die lieferbaren Geometrien der Katalysatorsubstrate aufgelistet. Die Substrate wären bei Bedarf mit größeren Durchmessern erhältlich. Um allerdings die Volumen- bzw. Massenströme bei den Experimenten so gering wie möglich zu halten, waren hier nur die kleinsten zwei von Interesse. Diese sind mit verschiedenen Längen und Zellenzahlen erhältlich. Aus der Anzahl der Zellen und vor allem ob es sich um einen keramischen oder metallischen Katalysatorträger handelt, ergeben sich verschiedene Bereiche für die offene Fläche. Für den Washcoat wurden drei verschiedene Aluminiumoxid-Legierungen vorgeschlagen. In der Tabelle sind die maximalen Einsatztemperaturen genannt. Obwohl das  $\gamma - Al_2O_3$  hier mit bis zu 850 °C angeführt wird, wurde bei einer dauerhaften Beanspruchung des Katalysators über 800 °C empfohlen den  $\alpha - Al_2O_3$ -Washcoat zu verwenden. Dieser kann jedoch nur eine geringere Oberflächenvergrößerung aufweisen. Als reaktives Material stehen die Edelmetalle Palladium, Platin und Rhodium zur Verfügung und können in einem Mengenbereich bis zu 300 g/ft<sup>3</sup> auf die Katalysatoren aufgetragen werden. Bei üblichen Abgaskatalysatoren werden etwa 20 – 75 g/ft<sup>3</sup> Edelmetall aufgetragen.

KATALYSATORTRÄGER	Cpsi			
	Durchmesser x Länge [mm]	100	200	300
28 x 20 / 25 / 30		X	X	X
33 x 20 / 30 / 74,5 / 90	X	X	X	
<b>OFA</b>				
Metall	93 %	93 %	92 %	92 %
Keramik	70 %	70 %	70 %	76 %

Tabelle 3.8: Katalysatorträger der Firma Heraeus

### 3.4 Gewählte Katalysatoren

Nachfolgend werden die Begründungen für die gewählten Katalysatorkonfigurationen, welche in *Tab. 3.9* aufgelistet sind, diskutiert.

#### Katalysatorlänge:

Da die Verbrennungsreaktionen sehr schnell ablaufen können, wurden hier sehr kurze Katalysatorlängen gewählt. Die Katalysatoren mit metallischen Substrat haben dabei eine einheitliche Länge von 30 mm. Der keramische Katalysator war nur mit 25 mm erhältlich. Von jedem Katalysatortyp wurden 3 Stück geordert und somit kann eine Katalysatorlänge bis zu 90 mm bei gleichbleibenden Parametern getestet werden. Zudem ist auch die Aneinanderreihung von Katalysatoren mit verschiedenen Eigenschaften möglich. Beispielsweise können, zur raschen Initiierung der Verbrennung, am Anfang der Kette ein Katalysator benetzt mit dem sehr reaktiven Palladium, gefolgt von Platinkatalysatoren, welche für höhere Temperaturen geeignet sind, angeordnet werden. In diesem Fall kann auch der axiale Verlauf der Temperatur durch die Anbringung von Thermoelementen und Druckmessstellen zwischen den einzelnen Stücken sehr gut abgebildet werden. Nachteilig ist, dass die Unterbrechung der einzelnen Zellen sowie die Einbringungen von Thermoelementen die Strömung beeinflussen.

#### Katalysatordurchmesser:

Die in der Tabelle angeführten Durchmesser definieren jenen Bereich der Katalysatoren, welcher mit einer Gitterstruktur versehen und somit durchströmt werden kann. Die feinen Waben der Metallkatalysatoren werden zudem mit einem Rohr, welches eine Wandstärke von 1,0 mm besitzt, stabilisiert (siehe *Abb. 2.8*). Gesamt ergibt sich somit, wie auch bei den keramischen Substraten, ein Durchmesser von 35 mm und alle Katalysatortypen können in einer einheitlichen Halterung positioniert werden. Bei diesen Durchmessern ist auch eine Bestellung von Katalysatoren mit einer Länge bis zu 90 mm, wie aus dem Lieferprogramm von Heraeus (siehe *Tab. 3.8*) ersichtlich, möglich.

Nr.	Länge] [mm]	Durchmesser [mm]	cpsi	Substrat	Washcoat	Edelmetall	Beladung [g/ft <sup>3</sup> ]
1	30	33	200	Metall	$\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$	<i>Pd</i>	150
2	30	33	200	Metall	$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	<i>Pd</i>	150
3	30	33	200	Metall	$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	<i>Pt</i>	150
4	30	33	200	Metall	$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	<i>Pt</i>	300
5	30	33	300	Metall	$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	<i>Pt</i>	150
6	30	33	100	Metall	$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	<i>Pt</i>	150
7	25	35	200	Keramik	$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	<i>Pt</i>	150
8	30	33	200	Metall	$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	<i>Rh</i>	150
9	30	33	200	Metall	–	–	–

**Tabelle 3.9:** Liste der gewählten Katalysatoren

**Zellenanzahl (cpsi):**

Bei der Zellenanzahl wurden alle lieferbaren Konfigurationen gewählt, wobei die meisten Katalysatoren mit 200 *cpsi* ausgestattet wurden.

**Substrat:**

Bei den Katalysatorträgern kommen, bis auf eine Katalysatorvariante, ausschließlich metallische Substrate zum Einsatz. Aufgrund der besseren Thermoschockbeständigkeit und da die Maximaltemperatur von 900 °C (reaktives Material) im Katalysator grundsätzlich nicht überschritten werden soll, eignen sich diese perfekt für die geplante Anwendung.

**Washcoat:**

Hier wurde, trotz der geringeren Oberflächenvergrößerung, auf Empfehlung des Herstellers, aufgrund der besseren Temperaturbeständigkeit, der  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  Washcoat gewählt. Um bei den Experimenten einen Vergleich zu erhalten, wurde Katalysator Nr. 2 mit dem  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  ausgestattet.

**Edelmetall:**

Bei dem reaktiven Material kommen alle drei verfügbaren Edelmetalle zum Einsatz. Palladium und Rhodium kommen aus Gründen ihrer hohen Reaktivität bei niedrigen Temperaturen zur Anwendung. Um die Aktivität des Katalysators auch bei höheren Temperaturen noch aufrecht erhalten zu können, wurde Platin gewählt. Da hier auch ein Reaktionsmechanismus, welcher für das neue Simulationsmodell verwendet werden soll, vorliegt, wurde ein Großteil der Katalysatoren mit Platin ausgewählt.

**Beladung:**

Bei den Experimenten von Ozawa[21] wurden die Katalysatoren mit 25 g/l reaktiven Material beaufschlagt. Das entspricht einer Beladung von ca. 700 g/ft<sup>3</sup>. Laut Heraeus ist eine solche Menge gänzlich übertrieben und zudem auch nicht lieferbar. Hier wurden Werte im Bereich 50 – 70 g/ft<sup>3</sup> empfohlen. Schlussendlich wurde ein Kompromiss gemacht und die meisten Katalysatoren wurden mit 150 g/ft<sup>3</sup> beaufschlagt. Mit ein Grund für diese Entscheidung war die zu erwartende hohe Reaktivität des Wasserstoffs.

Als Referenzkatalysator kann in *Tab. 3.9* die Konfiguration Nr. 3 angesehen werden. Bis auf die Variante Nr. 1, wo das Edelmetall und der Washcoat unterschiedlich sind, haben alle anderen Konfigurationen nur einen veränderlichen Parameter gegenüber dieser Variante. Katalysator Nr. 1 kann jedoch sehr gut mit der Nr. 2 verglichen werden. Zwischen diesen beiden Varianten wurde nur der Washcoat variiert. Katalysator Nr. 2 und 8 haben bezüglich des Referenzkatalysators lediglich Palladium bzw. Rhodium anstatt Platin als reaktives Material. Bei Nr. 4 wurde die doppelte Menge an Edelmetall auf den Katalysator aufgetragen. Vergleicht man die Konfigurationen 3, 5 und 6, kann der Einfluss der Zellenanzahl ermittelt werden. Variante 7 ist mit einem keramischen Katalysatorträger ausgestattet. Zusätzlich wurden auch 3 Katalysatoren ohne Washcoat und reaktiven Material geordert.

## Kapitel 4

# Auslegung und Simulation des Mischers

Um eine Zerstörung des Katalysator durch zu hohe Verbrennungstemperaturen zu verhindern, muss in erster Linie das richtige Verbrennungsluftverhältnis für den Volumenstrom durch den Katalysator gewählt werden. Damit auch partiell in allen Bereichen des Gemischs das gleiche  $\lambda$  herrscht, muss vor dem Eintritt in den Katalysator für eine homogene Durchmischung der beiden Massenströme gesorgt werden. Eine nachträgliche Vermischung der Gase wird durch die Wände der Katalysatorzellen verhindert. Gleiches ist für die Strömungsgeschwindigkeit gültig. Da die Verweilzeit des Brennstoff-Luft-Gemisches in jeder Zelle annähernd gleich sein soll, muss auch das axiale Geschwindigkeitsprofil schon vor dem Katalysator eine gleichmäßige Verteilung über den Rohrquerschnitt aufweisen. Des Weiteren soll die Mischstrecke zwischen Mischer und Katalysatoreintritt mit minimaler Länge ausgelegt werden. Die Begründung dafür liegt zum einen in einer möglichst geringen Baugröße der Brennkammer und zum anderen soll die Menge an zündfähigen Gemisch, für den Fall das es zu einer Rückzündung kommen sollte, so gering wie möglich sein. Wobei die Gefahr einer Rückzündung hier sehr gering ist. Die benötigte Temperatur zur Zündung des Wasserstoff-Luft-Gemischs im Katalysator und somit die im Mischrohr vorherrschende Temperatur wird mit weniger als 200 °C erwartet. Diese Temperatur liegt weit unter der Zündtemperatur für die Gasphasenverbrennung, wie *Tab. 2.1* zu entnehmen ist. Des Weiteren ist die max. laminare Brenngeschwindigkeit in diesem Bereich geringer als die Strömungsgeschwindigkeit des Gases. Einzig in der Strömungsgrenzschicht an der Rohrwand, wo die Geschwindigkeit gegen 0 geht, könnte sich die Verbrennung entgegen der Strömungsrichtung ausbreiten. Allerdings sollte das durch die Wärmeabfuhr an die "kalte" Wand verhindert werden. Nachfolgend sind die Anforderungen an den Mixer nochmals aufgelistet.

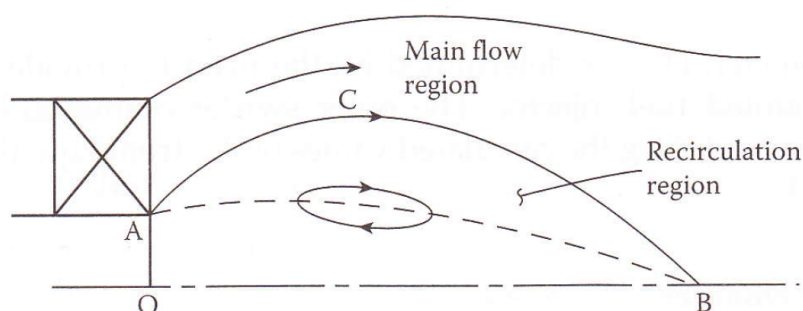
### Anforderung an den Mischer:

- Homogene Durchmischung des Brennstoff- und Luftmassenstroms
- Gleichmäßiges axiales Geschwindigkeitsprofil am Katalysatoreintritt
- Mischstrecke so kurz wie möglich
- Geringer Druckverlust

Um die geforderten Ansprüche zu erfüllen, wurden in weiterer Folge zwei Methoden, ein Drallerzeuger und ein Micro-Mixer, mittels numerischer Simulation untersucht und anhand der Ergebnisse die geeignete Apparatur ausgewählt.

## 4.1 Drallerzeuger

Bei dem Drallerzeuger handelt es sich um eine einfache Geometrie, welche sich sehr gut zur Erzeugung von Turbulenzen in Strömungen eignet. Hier kann zwischen zwei Haupttypen, dem Axial- und dem Radialdrallerzeuger, unterschieden werden. Beim Axialdrallerzeuger werden zur Initiierung des Dralls die Schaufeln, wie der Name schon sagt, in axialer und beim Radialdrallerzeuger in radialer Richtung durchströmt. Die endgültige Abströmung erfolgt bei beiden Varianten in axialer Richtung. Bei Brennkammeranwendungen wird der Drallerzeuger zur Flammenstabilisierung genutzt. Die zugeführte Verbrennungsluft strömt dabei mit einer hohen Geschwindigkeit durch den Drallerzeuger und tritt nachfolgend axial in die Brennkammer ein. Durch den induzierten Drall breitet sich die Strömung nach Eintritt in die Brennkammer in radialer Richtung aus und es bildet sich somit in der Mitte entlang der Achse eine Rezirkulationszone, wie in *Abb. 4.1* zu sehen. Des Weiteren wird durch die hohe Turbulenz in der Strömung eine rasche Durchmischung mit dem Brennstoff gewährleistet[2].



**Abbildung 4.1:** Strömungsfeld Drallerzeuger[2]

Quantifiziert werden die Drallerzeuger über die Drallzahl  $S_N$  (Swirl number). Diese setzt sich, wie in *Gl. (4.1)* zu sehen, aus dem Verhältnis des Umfangsimpulses  $G_\varphi$  zum Axialimpuls  $G_x$  zusammen. Zusätzlich fließt der Radius  $R$  mit in die Berechnung ein. Der Umfangs- und Axialimpuls sind nach *Gl. (4.2)* und *Gl. (4.3)* definiert.  $c_u$  und  $c_{ax}$  sind dabei die Geschwindigkeitskomponenten in Umfangsrichtung und axialer Richtung[10].

$$S_N = \frac{G_\varphi}{G_x R} \quad (4.1)$$

$$G_\varphi = \int_0^R (c_\varphi \cdot r) \cdot \rho \cdot c_{ax} \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr \quad (4.2)$$



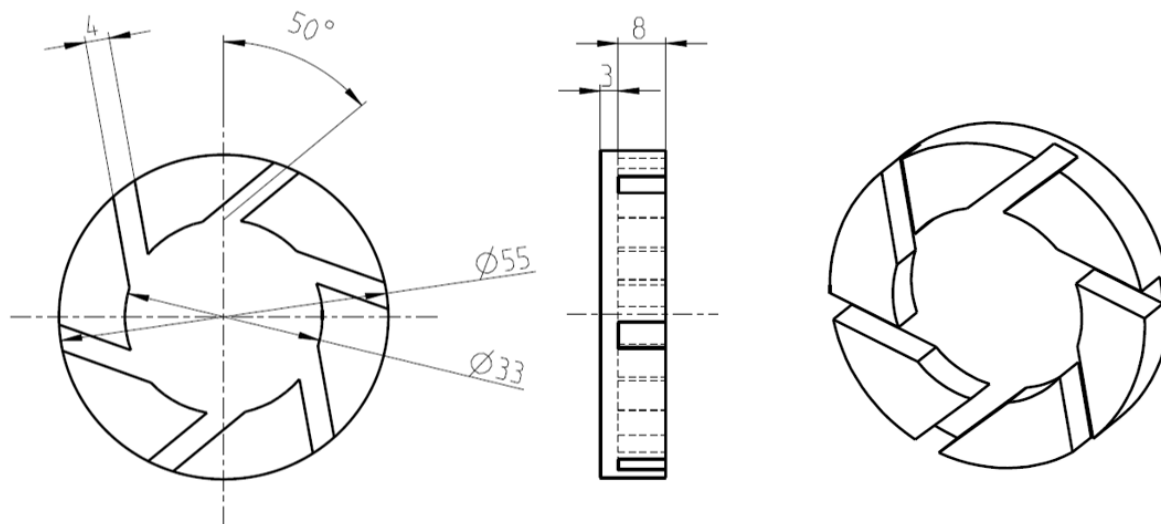
$$G_{ax} = \int_0^R c_{ax} \cdot \rho \cdot c_{ax} \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr + \int_0^R p \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr \quad (4.3)$$

Nachfolgend werden die Geometrien für die Drallerzeugersimulation näher erläutert.

#### 4.1.1 Drallerzeugergeometrien für die Simulation

Für diese Anwendung war in erster Linie die durch den Drall induzierte hohe Turbulenz von Interesse. Dadurch sollte eine sehr gute Durchmischung des Wasserstoffs und der Luft erreicht werden. Des Weiteren wurde der Querschnitt des Rohres nach dem Drallerzeuger konstant gehalten und nicht wie bei den Brennkammeranwendungen beim Brennkammereintritt vergrößert, dadurch sollte auch der Rezirkulationsbereich in der Mitte gering gehalten werden können.

In *Abb. 4.2* ist die Geometrie des Drallerzeugers für die ersten Simulationen abgebildet. Das Bauteil besitzt sechs über den Umfang gleichmäßig verteilte Kanäle. Da die Fertigung einfach gehalten werden sollte, wurden gerade Kanäle gewählt. Der Austrittsquerschnitt/Innendurchmesser des Drallerzeugers wurde anhand der Katalysatordurchmesser (*Kap. 3.4*) bestimmt. Die Querschnittsflächen der Kanäle wurden so gewählt, dass die mittlere Geschwindigkeit bei der Durchströmung in etwa vier mal größer als jene durch den Austrittsquerschnitt ist. Als Grundlage für die Wahl des Winkels wurde die Arbeit von Nazri (2011)[24] verwendet. Hier kamen Drallerzeuger mit 40°, 50° und 60°, wo durch Drallzahlen von 0,49, 1,29 und 2,29 bei der Verwendung von geraden Kanälen erreicht wurden, zum Einsatz.



**Abbildung 4.2:** Abmessungen Drallerzeuger

In *Tab. 4.1* sind die verschiedenen Varianten für die Drallerzeugersimulationen angeführt. An dieser Stelle kann vorweggenommen werden, wie später bei der Auswertung der Simulationen noch zu sehen (*Kap. 4.4*), dass es bei dem Drallerzeuger mit 50° zu einer Rückströmung in der Kanalmitte nach dem Drallerzeuger gekommen ist. Dieses Strömungsverhalten ist auch mit fortschreitender axialer Richtung nur schwach abgeklungen. Daraufhin wurde beschlossen, noch

weitere Varianten mit einem Winkel von  $25^\circ$  und  $0^\circ$  zu testen. Ebenso wurde durch die Anwendung eines zweiten Drallerzeugers, dessen Kanäle für die Erzeugung eines Dralls in die entgegengesetzte Richtung positioniert wurden, probiert, den induzierten Drall des ersten Drallerzeugers entgegenzuwirken und aufzuheben. Durch den Zusammenstoß der beiden Ströme wurde wiederum eine sehr gute Durchmischung des Brennstoff-Luft Gemischs erwartet.

VARIANTEN	1 Drallerzeuger			2 Drallerzeuger	
Winkel [°]	50	25	0	50	25
Kanalanzahl	6				
Außendurchmesser [mm]	55				
Innendurchmesser [mm]	33				
Kanalbreite [mm]	4				
axiale Tiefe [mm]	8			4	

Tabelle 4.1: Varianten für die Drallerzeugersimulation

Der gesamte Aufbau der Geometrien für die Simulationen, welcher die Zuströmungsleitungen für die Luft und den Brennstoffs sowie das Abströmrohr für das Gemisch enthalten, sind in *Abb. 4.4* dargestellt. Die Verbrennungsluft wird dabei durch ein Rohr mit 70 mm Durchmesser zum Drallerzeuger geführt. Bei der Anwendung mit nur einem Drallerzeuger wird der Wasserstoff durch sechs 3 mm-Röhrchen, welche in einen Flansch gebohrt werden, direkt entgegen der Hauptströmungsrichtung in die einzelnen Strömungskanäle eingedüst. Hingegen sollte bei der Variante mit zwei Drallerzeugern der Wasserstoff bereits in den ersten Drallerzeuger eingebracht werden, um in diesem Bereich schon für eine Durchmischung der beiden Massenströme zu sorgen. Als Abströmrohr bzw. Mischstrecke wurde ein Kanal mit 33 mm Durchmesser vorgesehen.

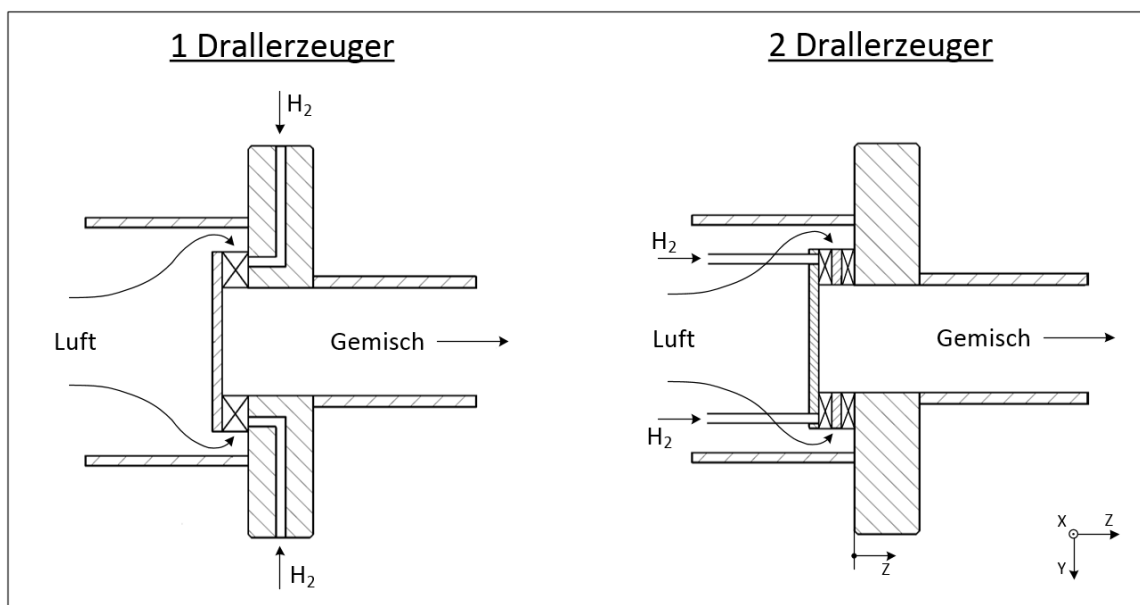


Abbildung 4.3: Geometrie für die Drallerzeuger-Simulation

## 4.2 Micro-Mixer

Der Micro-Mixer, ein neuartiger Vormischbrenner zur Eindüsung von wasserstoffreichen Brennstoffen wurde von York et al.[25] postuliert. Bei diesem Konzept wurde vor allem auf die Generierung geringer Emissionen, einen akzeptablen Druckverlust sowie ein rückzündfreies Betriebsverhalten geachtet. Realisiert wird das Ganze durch die Verwendung mehrerer Düsen mit geringen Durchmessern, bei denen durch kleine Bohrungen in den Wänden der Brennstoff in die vorbeiströmende Verbrennungsluft eingebracht wird. Siehe *Abb. 4.4*. Die Strömungsgeschwindigkeit der Luft muss dabei über der Brenngeschwindigkeit der Mischung liegen, um eine Rückzündung und die damit verbundene Zerstörung des Mixers zu verhindern. Zur Erreichung einer entsprechenden Durchmischung des Brennstoffs und der Verbrennungsluft innerhalb der Düse sollte die Länge ab der Position der Brennstoffinjektion bis zum Düsenaustritt bezogen auf den Düsendurchmesser einen Wert zwischen 1 und 10 ergeben.

### 4.2.1 Micro-Mixer-Geometrien für die Simulation

Mit den Informationen aus dem Paper wurde in weiterer Folge ein entsprechendes Micro-Mixer-Konzept zur Erreichung der homogenen Durchmischung ausgearbeitet. Um den Mixer fertigungsgerecht auslegen zu können, wurde zudem bereits im Vorfeld der Planung mit der Fa. Anton Paar, welche Metallwerkstücke in 3-D Druck fertigen können, Rücksprache gehalten. Hier konnte in Erfahrung gebracht werden, dass bei dem 3-D Druckverfahren Wandstärken und kleine Lochdurchmesser bis zu einem Minimalwert von 0,5 mm fehlerfrei abgebildet werden können. Im nächsten Schritt wurde die Aufteilung der Düsen, hinsichtlich folgender Parameter ausgelegt.

#### Auslegungsparameter:

- An- und Abströmdurchmesser
- maximale Düsenanzahl
- maximaler Düsendurchmesser
- kurze Mixerlänge

Der Durchmesser für die Rohre vor und nach dem Micro-Mixer wurden anhand der gewählten Katalysatoren  $d_{Kat} = 33$  mm bestimmt. Des Weiteren sollten, um schon bei der Injektion des Wasserstoffs eine gute Verteilung zu erreichen, eine möglichst große Anzahl an Düsen verwendet werden. Um die Beschleunigung der Strömung durch die Querschnittsverengung gering zu halten, sollte der Düsendurchmesser am Eintritt in den Mixer maximiert werden. Der Grund hierfür rührt aus dem geforderten gleichmäßigen axialen Geschwindigkeitsprofil vor dem Katalysator. Das Strömungsprofil beim Austritt des Gemischs aus den Düsen entspricht jenem eines Freistrahls und muss sich im Verlauf der nachfolgenden Mischrohrlänge beruhigen. Zusätzlich sollte eine geringe Länge gewählt werden, um die Fertigungskosten des Micro-Mixers zu minimieren.

Das Ergebnis dieser Optimierung ist in *Abb. 4.4* zu sehen. Innerhalb des vorgegeben Querschnitts befinden sich nun 19 Düsen mit einem Einströmdurchmesser von 4,5 mm. Da in weiterer Folge auch Simulationen mit geringen Anströmgeschwindigkeiten durchgeführt wurden (siehe *Kap.*

4.3), sind hier die Düsen mit kegeligen Verlauf und einem Austrittsdurchmesser von 3 mm dargestellt. Durch die Querschnittsverengung am Austritt der Düsen wird zwar die Austrittsgeschwindigkeit erhöht, allerdings die Gefahr einer Rückzündung in die Düse unterbunden bzw. verringert. Die Wandstärke der Düsen wurde mit 0,6 mm gewählt, um noch eine geringe zusätzliche Sicherheit auf die minimale Wandstärke zu gewährleisten. Zwischen den Düsen wurde noch genügend Platz vorgesehen, sodass sich der Wasserstoff ungehindert ausbreiten kann. Des Weiteren wurde jede der einzelnen Düsen mit vier kleinen Wasserstoffinjektionslöchern versehen. Um für eine sanfte Einströmung der Verbrennungsluft zu sorgen, sind die Düsen an dieser Stelle (rechtes Bild, linke Seite) leicht abgerundet. Die Versorgung der 19 Düsen wurde, wie weiters auf dem rechten Bild zu sehen, auf zwei separate Kammern aufgeteilt, um eine mögliche Unterversorgung der mittleren Düsen zu verhindern. Dabei werden die 12 Düsen im äußeren Ring durch die rechte und die sechs Düsen des inneren Rings sowie die mittlere Düse durch die linke Kammer versorgt. Die Versorgungsbohrungen im Außenmantel des Mixers wurden dahingehend ausgelegt, dass bei beiden Querschnitten, je nach Massenstrom (12/19 und 7/19 des Gesamtbrennstoffmassenstroms), annähernd die gleichen Strömungsgeschwindigkeiten herrschen (siehe Kap. 4.3). Die Wasserstoffinjektionslöcher haben Abstände von 18mm bzw. 22mm bis zum Düsenaustritt, wodurch sich Längen zu Durchmesser Verhältnisse von 4,0 bzw. 4,9 bei zylindrischen und 6,0 bzw. 7,3 bei kegeligen Düsen ergeben.

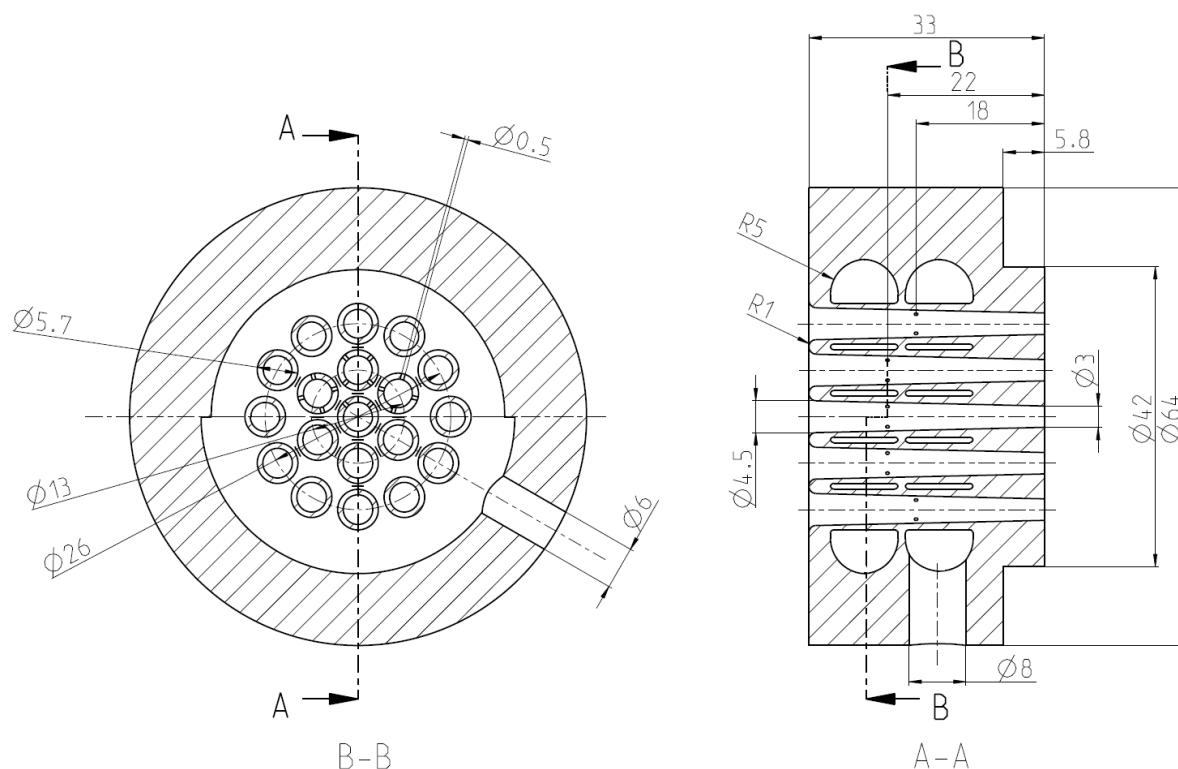


Abbildung 4.4: Micro-Mixer 19-2-4-05-c

In Tab. 4.2 sind die verschiedenen Mixer-Konfigurationen angeführt. Für die Wasserstoffinjektionslöcher wurden Durchmesser von 0,5 mm und 1,0 mm gewählt. Des Weiteren wurden auch Varianten mit zylindrischen Düsen untersucht. Details dazu siehe Kap. 4.3.

Hier ist noch zu erwähnen, dass die erste Variante, Micro-Mixer 19-3-4-05, hinsichtlich der Geometrie etwas anders aufgebaut ist. Die 12 Düsen des äußeren Rings werden bei diesem Mixer durch die linke Kammer versorgt. Zusätzlich wurde der zugeführte Gesamtmassenstrom für diesen Bereich auf zwei gegenüberliegende Versorgungsbohrungen aufgeteilt. Dadurch ergibt sich für diese Konfiguration folgende Aufteilung der Wasserstoffmassenströme. Linke Kammer  $2 \times 6/12$  und rechte Kammer  $1 \times 7/12$  des Gesamtmassenstroms. Zusammen ergibt das 3 Wasserstoffanschlüsse, welche alle mit dem gleichen Durchmesser (6 mm) ausgeführt wurden. Alle anderen Varianten entsprechen, bis auf die Durchmesser der Wasserstoffinjektionslöcher und dem kegeligen Verlauf der Düsen, der Geometrie in *Abb. 4.4*

VARIANTEN	zylindrisch			kegelig	
Bezeichnung	19-3-4-05	19-2-4-05	19-2-4-1	19-2-4-05-c	19-2-4-1-c
Düsenanzahl	19				
H <sub>2</sub> -Anschlüsse	3	2			
H <sub>2</sub> -Bohrungen je Düse	4				
Ø H <sub>2</sub> -Bohrung [mm]	0,5	1,0	0,5	1,0	
Ø Düsen Eintritt [mm]	4,5				
Ø Düsenaustritt [mm]	4,5			3,0	

Tabelle 4.2: Varianten für die Micro-Mixer-Simulation

In *Abb. 4.5* ist der Gesamtaufbau der Geometrie für die Simulation abgebildet. Die Verbrennungsluft tritt dabei von links in den Micro-Mixer, in diesem Fall mit zylindrischen Düsen, ein, wird dort beschleunigt und mit dem Wasserstoff vermischt und strömt nachfolgend in das Mischrohr. Dort soll die restliche Durchmischung sowie der Ausgleich der axialen Geschwindigkeiten gewährleistet werden.

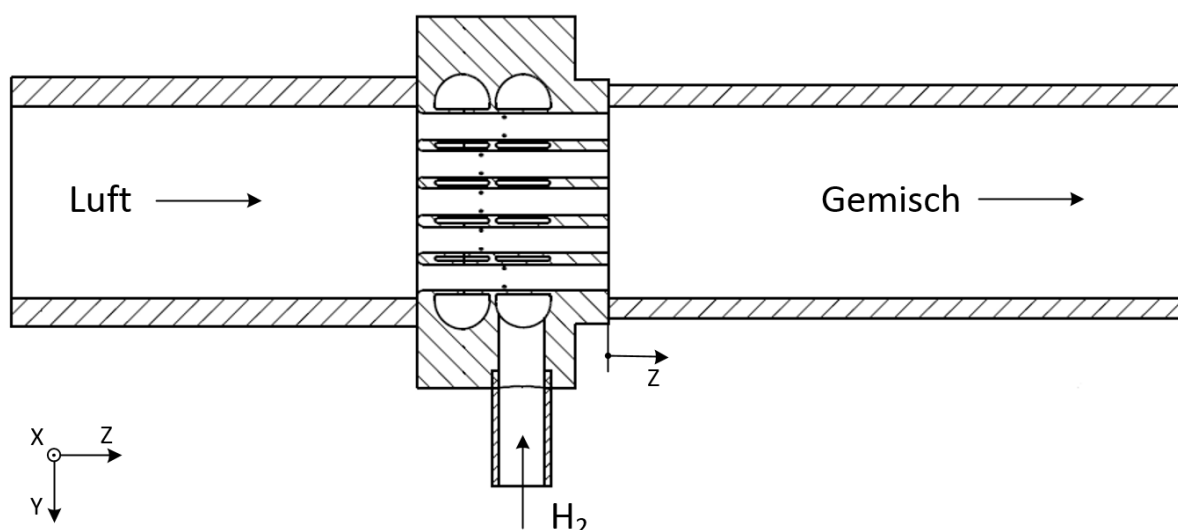


Abbildung 4.5: Geometrie für die Micro-Mixer-Simulation

### 4.3 Abschätzung der Strömungsbedingungen

Die ersten Simulationen wurden bei einer mittleren Geschwindigkeit von 15 m/s im Mischrohr und einem mageren Verbrennungsluftverhältnis von  $\lambda = 3$  durchgeführt. Da hier zu Beginn noch keine Bezeichnung definiert wurde, scheinen diese Bedingungen in *Tab. 4.3* als Betriebspunkt 5 auf. In einer weiteren Abschätzung sollte die am Prüfstand umgesetzte thermische Leistung eine Größenordnung von 25 kW bei atmosphärischen Druckverhältnissen nicht überschreiten. Da die ersten Versuche, aufgrund der Gefahr der superadiabaten Flammtemperatur, voraussichtlich unter fetten Brennstoff-Luft-Verhältnissen (siehe *Kap. 6*) durchgeführt werden, ergibt sich bei einem  $\lambda = 0,33$  bei normatmosphärischen Bedingungen (ISA: 1,01325 bar und 15 °C) ca. eine mittlere Strömungsgeschwindigkeit von 5 m/s im Mischrohr vor dem Katalysator. Ausgehend von dieser Geschwindigkeit und diesem Verbrennungsluftverhältnis wurde, wie in *Tab. 4.3* zu sehen, Betriebspunkt 1 ausgelegt. Bei Betriebspunkt 2 und 3 wurde die Geschwindigkeit konstant gehalten und nur das Verbrennungsluftverhältnis bis hin zu den mageren Verhältnissen  $\lambda = 3.0$  verändert. Die Simulation unter stöchiometrischen Bedingungen (BP 2) soll als Referenz dienen. Bzw. sollen die Mixer nachträglich auch für Vormischverbrennungsanwendungen getestet werden. Da bei vergleichbaren Anwendungen (*Kap. 3.1*) weitaus höhere Geschwindigkeiten verwendet wurden, sollten die Mischer auch unter diesen Bedingungen getestet werden. Wie zu sehen ist, liegt die thermische Leistung des 4. Betriebspunkts deutlich über der angesetzten Grenze. Hier wird das Augenmerk bei den Simulationen eher auf das Strömungsverhalten in den Mischern, bei dieser mittleren Einströmgeschwindigkeit in den Katalysator, gelegt.

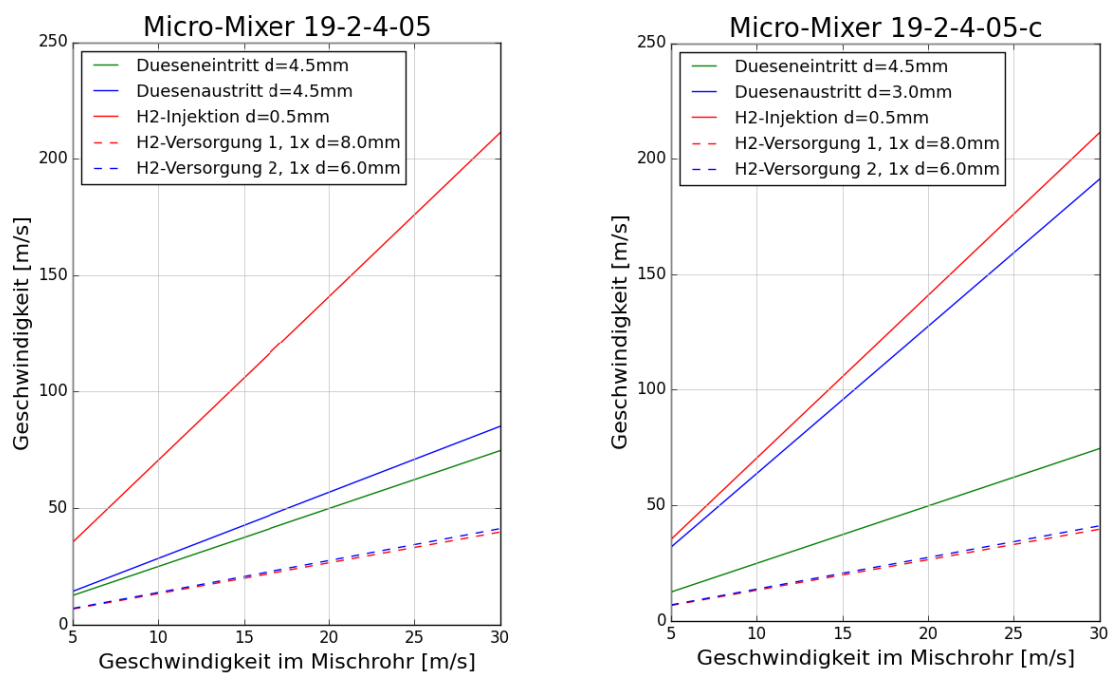
BETRIEBSPUNKT	1	2	3	4	5
Luftverhältnis ( $\lambda$ )	0,33	1.0	3.0		
Geschwindigkeit [m/s]	5			30	15
Thermische Leistung [kW]	24,5	12,9	5,4	32,2	16,1
H <sub>2</sub> -Massenstrom [g/s]	0,2042	0,1078	0,0448	0,2687	0,1344
Luft-Massenstrom [g/s]	2,296	3,675	4,577	27,463	13,732

**Tabelle 4.3:** Betriebspunkte für die Simulation

Bei der Anwendung dieser Betriebspunkte auf die diversen Mischergeometrien ergeben sich natürlich unterschiedliche Geschwindigkeiten in den einzelnen Bereichen. Wie bereits in *Kap. 4.1.1* besprochen, stellen sich beim Drallerzeuger Geschwindigkeiten in vierfacher Größenordnung, bezogen auf die mittlere Geschwindigkeit im Mischrohr, ein. Dadurch ergeben sich bei den Betriebspunkten 1 – 3 Geschwindigkeiten von etwa 20 m/s sowie 120 m/s und 60 m/s bei den Betriebspunkten 4 und 5. Das Ganze ist bei den Micro-Mixer-Geometrien etwas komplexer. Hier müssen unter anderem auch die Strömungsgeschwindigkeiten bei den Wasserstoffinjektionslöchern beachtet werden. In den folgenden Abbildungen sind die Strömungsgeschwindigkeiten, bezogen auf die Geschwindigkeit des Gemischs im Mischrohr, für diverse Micro-Mixer dargestellt.

*Abb. 4.6* zeigt alle relevanten Geschwindigkeiten des Micro-Mixers unter mageren Bedingungen. Durch die grüne und die blaue Linie sind dabei die Ein- bzw. Ausströmgeschwindigkeiten der Düsen dargestellt. Es ist sehr gut ersichtlich, dass sich durch den geringen Austrittsquerschnitt

schnitt der kegeligen Düse bei den Konditionen mit 30 m/s im Mischrohr eine Geschwindigkeit von beinahe 200 m/s, was mehr als eine Verdoppelung gegenüber der zylindrischen Düse bedeutet, einstellt. Bei einer Schallgeschwindigkeit der Luft von  $\sim 330$  m/s würde das zu einer unerwünschten Mach-Zahl von  $\sim 0,6$  führen und somit wird der Cone-Mixer bei den mageren Bedingungen nicht verwendet. Beim Wasserstoff ist die große Strömungsgeschwindigkeit bei der Injektion in die Düsen wiederum kein Problem, da hier die Schallgeschwindigkeit, wie aus *Tab. 2.1* zu entnehmen, bei 1246 m/s liegt und sich daher nur eine geringe Ma-Zahl von  $\sim 0,16$  ergibt. Zusätzlich steigt mit der Geschwindigkeit auch der Impuls des eintretenden Wasserstoffstroms, wodurch der Wasserstoff tiefer in den vorbeiströmenden Luftstrom eindringen kann und somit eine bessere Durchmischung erwartet wird. Durch die strichlierten Linien sind noch die Eintrittsgeschwindigkeiten in die Versorgungskammern dargestellt. Wie bereits erwähnt, wurden hier die Querschnitte dahingehend gewählt, dass sich trotz der unterschiedlichen Massenströme beinahe identische Geschwindigkeiten ergeben.



**Abbildung 4.6:** Geschwindigkeiten im Micro-Mixer bei  $\lambda = 3,0$

In *Abb. 4.7* sind die Geschwindigkeitsverläufe bei einem fetten Verbrennungsluftverhältnis dargestellt. Hier ist ersichtlich, dass sich bei dem Micro-Mixer mit 0,5 mm  $H_2$ -Injektionslöchern (linke Abbildung), bereits bei sehr geringen Geschwindigkeiten im Mischrohr, große Wasserstoffeinströmgeschwindigkeiten einstellen. Daher wurde, wie in der rechten Abbildung zu sehen, für diesen Betriebspunkt auch mit 1,0 mm Injektionslöchern simuliert. Weiters ist im rechten Bild wiederum die erhöhte Düsenaustrittsgeschwindigkeit durch die Verwendung der kegeligen Düse zu sehen. Bei 5 m/s im Mischrohr ergeben sich dadurch etwa 35 m/s am Düsenaustritt. Im Falle einer Rückzündung bis in das Mischrohr soll somit zumindest sichergestellt werden, dass die Flamme nicht in den Micro-Mixer zurückbrennen kann.

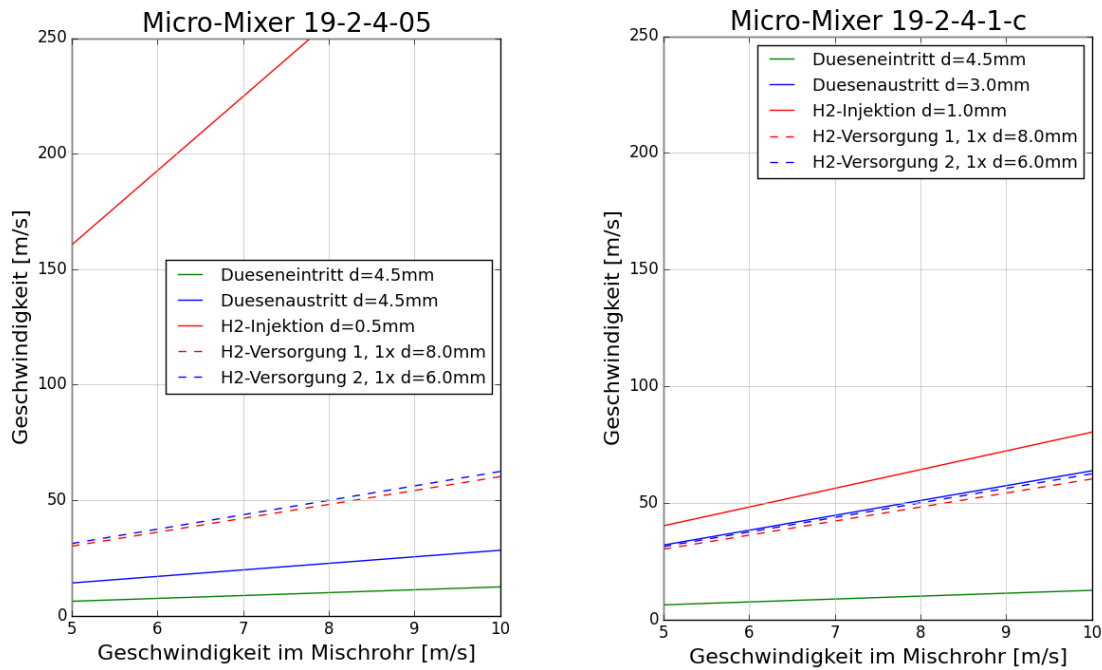


Abbildung 4.7: Geschwindigkeiten im Micro-Mixer bei  $\lambda = 0,33$

#### 4.4 Details zur Simulation

Die gesamten Simulationen wurden von der Firma SES-Tec unter Verwendung der CFD-Software FLUENT durchgeführt. Als Randbedingungen und für den Löser wurden folgende Parameter gewählt.

##### Randbedingungen und Löser für die Simulation:

- Die verschiedenen Betriebspunkte (*Kap. 4.3*)
- Normbedingungen nach ISA am Mischrohraustritt (1,01325 bar und 15 °C)
- FLUENT Standard-Wandbedingungen
- FLUENT RSM Turbulenzmodell
- Kompressibles ideales Gas
- Ein Löser zweiter Ordnung für die Impulsgleichung
- Residuen bei  $10^{-3}$

Des Weiteren wurde von den Drallerzeuger- und den Micro-Mixer-Geometrien, welche vom Autor zur Verfügung gestellt wurden, ein Negativ erzeugt und mit einem Gitter aus bis zu 6 Mio. Zellen versehen. Zusätzlich wurden die Zu- und Abströmröhre auf den 10-fachen Durchmesser verlängert, um hier eine Beeinflussung der Durchmischung bzw. des Strömungsverhaltens zu verhindern.



#### 4.4.1 Parameter für die Auswertung

In diesem Kapitel werden die zur Auswertung der Simulationen herangezogenen Parameter und Schnitte angeführt und kurz beschrieben. Die Positionen der Schnitte, welche in *Tab. 4.4* aufgelistet sind, richten sich dabei nach den Koordinatensystemen in den Abbildungen der Geometrien für die Simulationen (*Abb. 4.3* und *Abb. 4.5*). Die Startwerte für die Z-Koordinate sind ebenfalls diesen Abbildungen zu entnehmen. Der Nullpunkt der X- und Y-Koordinate befindet sich bei beiden Geometrien an der Achse des Mischrohres.

Parameter	Plot	Schnittebene	Position [mm]
Drallzahl	Wert	X – Y	Z = 0
Geschwindigkeitsverteilung	Farbplot	Y – Z	X = 0
$H_2$ -Massenverteilung ( $Y_{H_2}$ )	Farbplot	Y – Z	X = 0
Druckverteilung	Farbplot	Y – Z	X = 0
Verbrennungsluftverhältnis ( $\lambda$ )	Farbplot	X – Y	Z = 20 – 100
Uniformity Index flächengewichtet	Wert	X – Y	Z = 20 – 100
Uniformity Index massengewichtet	Wert	X – Y	Z = 20 – 100
Axiales Geschwindigkeitsprofil	Profilplot	X – Y / Y – Z	Z = 20 – 100
Druckverlust ( $\Delta p$ ) des Systems	Wert	–	–

**Tabelle 4.4:** Parameter und Positionen für die Auswertung der Simulationen

Die **Drallzahl** wurde bereits in *Kap. 4.1* beschrieben und wird nachfolgend zum Vergleich der einzelnen Drallerzeuger herangezogen.

Die nächsten drei Parameter, **Geschwindigkeitsverteilung**,  **$H_2$ -Massenverteilung** und die **Druckverteilung**, dienen zur Visualisierung des Strömungsverhaltens in axialer Richtung. Dadurch können Bereiche mit hohen Geschwindigkeiten, das Verhalten des Wasserstoff beim Zusammentreffen mit der Verbrennungsluft sowie Unter- bzw. Überdruckgebiete sehr gut identifiziert werden.

Zur Verifizierung der Durchmischung des Brennstoffs und der Luft werden das **Verbrennungsluftverhältnis** sowie der **flächen-** bzw. **massengewichtete Uniformity Index** verwendet. Die Farbplots des Verbrennungsluftverhältnisses sollen die lokale Durchmischung des Brennstoffs und der Verbrennungsluft über den Mischrohrquerschnitt visuell darstellen. Zur einfacheren Interpretation wurde hier das Verbrennungsluftverhältnis anstelle des Wasserstoffmassenanteils verwendet. Die beiden Uniformity Indizes hingegen werden für den Wasserstoffmassenanteil berechnet und repräsentieren wie stark die Verteilung einer Feldgröße über eine bestimmte Fläche variiert. Ein Wert von 1 bedeutet dabei die größte Einheitlichkeit über den Querschnitt. Wie obig erwähnt, kann hier zwischen flächen- und massengewichteten Uniformity Index unterschieden werden. Durch Ersteren wird dabei die Variation der Menge, in diesem Fall der Wasserstoffmassenanteil identifiziert. Hingegen wird beim massengewichteten Uniformity Index zusätzlich die Variation der Strömung mitberücksichtigt[26]. Vor allem beim Micro-Mixer, wo es beinahe

keine Querbewegungen zur Hauptströmungsrichtung geben sollte, kann dieser Parameter auch zur Verifizierung der Axialgeschwindigkeit herangezogen werden.

Der flächengewichtete Uniformity Index ( $\gamma_a$ ) wird nach Gl. (4.4) unter Verwendung des flächengewichteten Massenanteils ( $Y_a$ ) Gl. (4.5) berechnet.

$$\gamma_a = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n [|Y_i - Y_a| A_i]}{2 |Y_a| \sum_{i=1}^n A_i} \quad (4.4)$$

$$Y_a = \frac{\sum_{i=1}^n Y_i A_i}{\sum_{i=1}^n A_i} \quad (4.5)$$

Der massengewichtete Uniformity Index beinhaltet zusätzlich noch die Dichte sowie die lokale Geschwindigkeit und ergibt sich nach Gl. (4.6) mit der massengewichteten Massenverteilung Gl. (4.7).

$$\gamma_m = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n [|Y_i - Y_m| |\rho_i \vec{v}_i A_i|]}{2 |Y_m| \sum_{i=1}^n |\rho_i \vec{v}_i A_i|} \quad (4.6)$$

$$Y_m = \frac{\sum_{i=1}^n Y_i |\rho_i \vec{v}_i A_i|}{\sum_{i=1}^n |\rho_i \vec{v}_i A_i|} \quad (4.7)$$

Mit dem **axialen Geschwindigkeitsprofil** wird das Profil für die Anströmung des Katalysators überprüft. Durch die beiden Schnittebenen, wie in Tab. 4.4 angeführt, bleibt nur noch eine Linie entlang der Y-Achse übrig. An dieser vertikalen Linie wird die Strömungsgeschwindigkeit in axialer Richtung ausgewertet.

Der **Druckverlust des Systems** kann immer nur innerhalb eines Betriebspunktes verglichen werden. Ändert sich die Strömungsgeschwindigkeit durch den Mischer, steht dies auch direkt im Zusammenhang mit dem Druckverlust. Da der Druckverlust so gering wie möglich gehalten werden soll, werden die beiden Geometrien ebenfalls dahingehend untersucht.

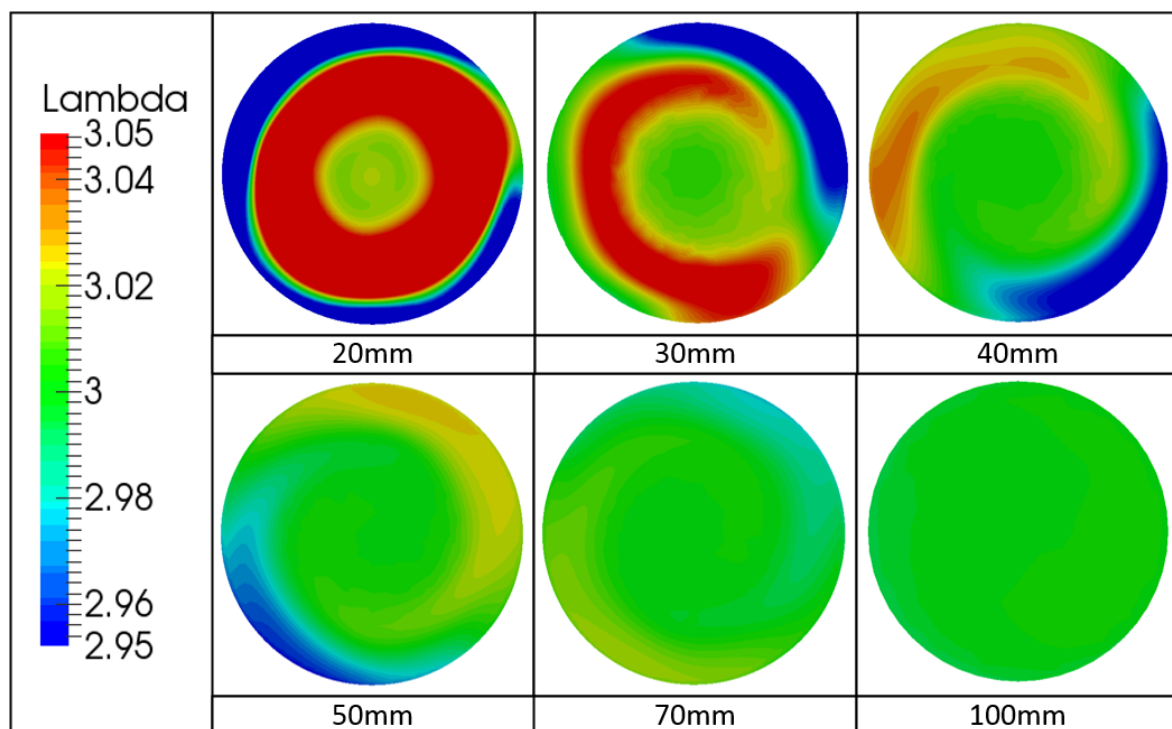
Zur nachfolgenden Verifizierung der Simulationen werden aus diesem Pool die entsprechenden Parameter ausgewählt.

## 4.5 Resultate der Drallerzeugersimulation

Primär wurden die folgenden Simulationsergebnisse durch die Firma SES-Tec ausgearbeitet und zur Verfügung gestellt. Bei den unterschiedlichen Simulationen wurden allerdings oftmals auch unterschiedliche Wertebereiche verwendet, wodurch ein sinnvoller Vergleich der Ergebnisse nicht möglich war. Aus diesem Grund wurden sämtliche visuellen Resultate erneut vom Verfasser dieser Arbeit ausgewertet und werden nachfolgend präsentiert. Die berechneten Werte (Drallzahl, Uniformity Index, Druckverlust) hingegen wurden aus den Ausarbeitungen der Firma SES-Tec übernommen.

Bei der ersten Simulation wurde die Drallerzeugervariante mit einem Drallerzeuger und einem Kanalwinkel von  $50^\circ$  gewählt. Diese Konfiguration wurde unter Betriebspunkt 5 (siehe *Tab. 4.3*) simuliert.

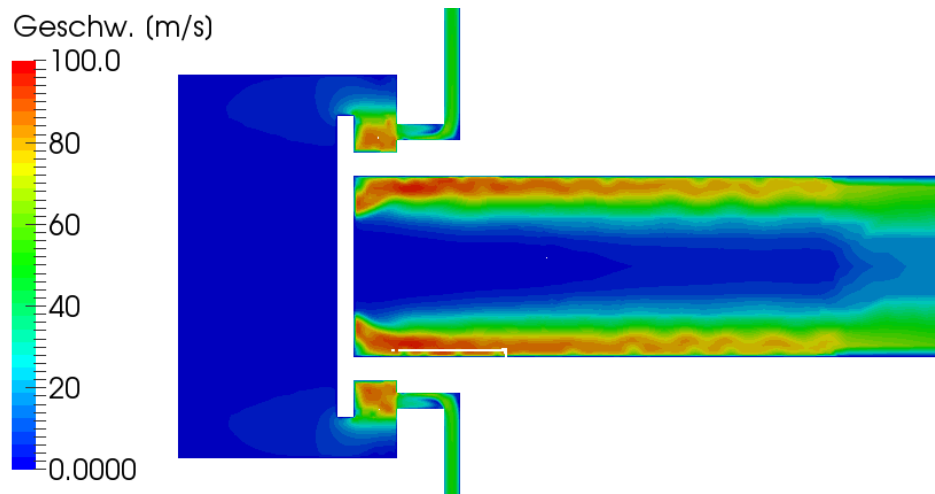
In *Abb. 4.8* ist das Verbrennungsluftverhältnis  $\lambda$ , an verschiedenen Positionen im Mischrohr, abgebildet. Wie zu sehen ist, stellt sich bereits nach 50 – 70 mm nach dem Austritt aus dem Drallerzeuger eine sehr homogene Durchmischung, bezogen auf den Sollwert dieses Betriebspunkts  $\lambda = 3$ , ein. Bei dem Schnitt nach 100 mm ist beinahe keine Abweichung mehr feststellbar.



**Abbildung 4.8:**  $\lambda$  an verschiedenen Positionen in Strömungsrichtung für  $50^\circ$  Drallerzeuger

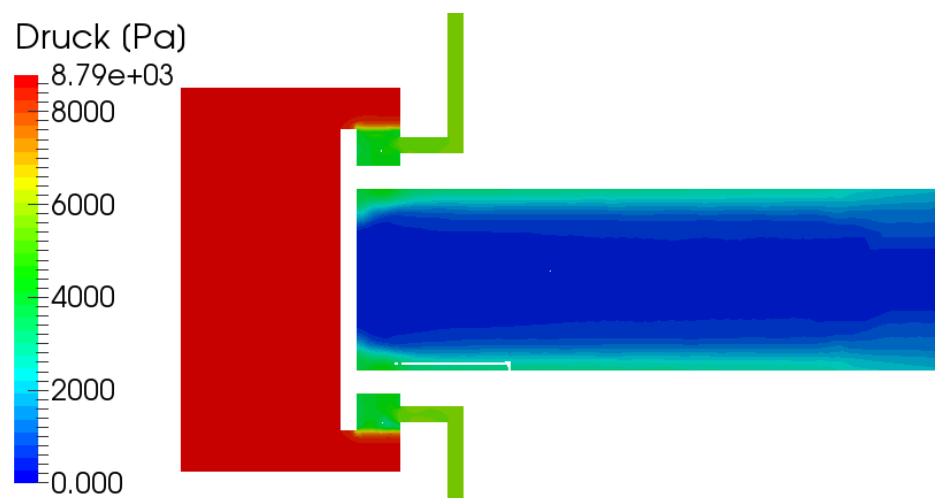
In der nächsten Abbildung (*Abb. 4.9*) ist die Geschwindigkeit im Mischrohr dargestellt. Der Schnitt entspricht der Geometrie in *Abb. 4.3*. Die Verbrennungsluft wird von der linken Seite zugeführt und strömt durch den Drallerzeuger, wo durch die Röhrrchen der Wasserstoff eingebracht wird. Durch die Induzierung des Dralls und die dadurch entstehende Fliehkraft wird die Strömung nach außen an die Mischrohrwand gedrückt. Dementsprechend sind in diesem Bereich

auch die größten Geschwindigkeiten feststellbar. Weiters ist erkennbar, dass dieses Verhalten stromabwärts nur sehr gering nachlässt.



**Abbildung 4.9:** Geschwindigkeitsverteilung für 50° Drallerzeuger

Ein vergleichbares Verhalten ist in *Abb. 4.10*, wo der Druck abgebildet ist, feststellbar. Betrachtet man nur das Mischrohr, sind hier wiederum in Wandnähe die größten Werte zu lokalisieren. Des weiteren ist noch ein deutlicher Druckverlust durch den Drallerzeuger erkennbar. Die Simulation hat hier ein Gesamtdruckverlust zwischen Ein- und Austritt von 74,8 mbar ergeben.



**Abbildung 4.10:** Druckverteilung für 50° Drallerzeuger

In einer weiteren Abbildung (*Abb. 4.11*) wurde das Verhalten der Strömungsgeschwindigkeit noch im Detail untersucht. Hier ist nur die axiale Komponente der Geschwindigkeit, 20 mm, 40 mm bzw. 70 mm nach dem Drallerzeuger, in Strömungsrichtung ausgewiesen. Durch die rote Linie wird dabei die mittlere Geschwindigkeit, welche sich bei BP 4 im Mischrohr einstellen sollte, dargestellt. Leider ist hier in der Mitte des Rohres eine negative, genauer gesagt eine Geschwindigkeit entgegen der Strömungsrichtung feststellbar. Dies entspricht jener Rezirkulationszone, welche für die Flammenstabilisierung verwendet wird und konnte auch durch den

geringen Durchmesser des Mischrohres nicht unterdrückt werden. Mit diesen Ergebnissen kann die Anforderung eines gleichmäßigen Geschwindigkeitsprofils nicht erfüllt werden.

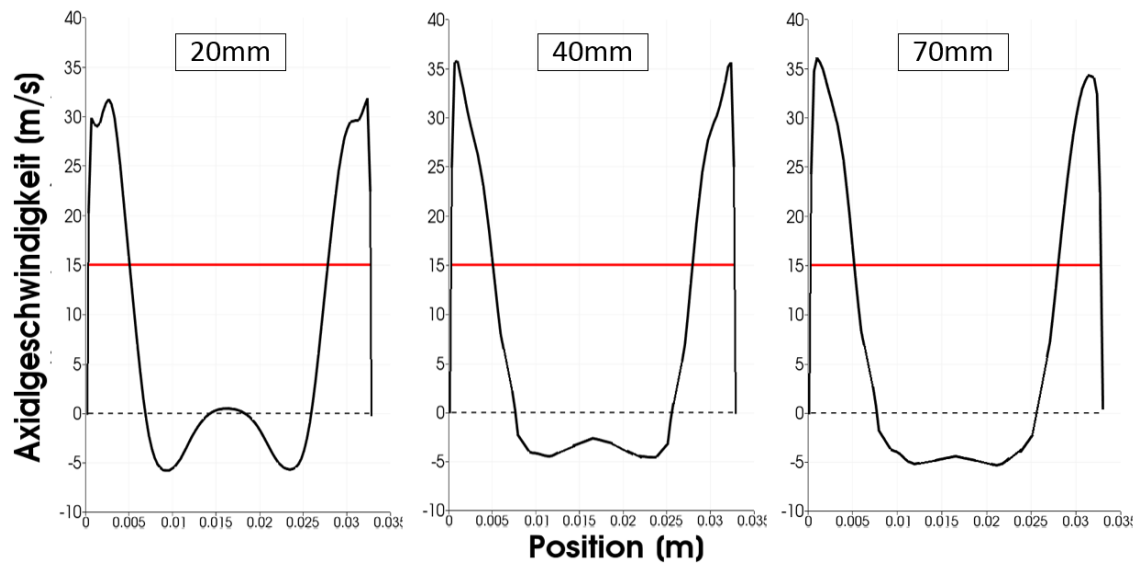


Abbildung 4.11: Axiales Geschwindigkeitsprofil für 50° Drallerzeuger

Ausgehend von den ersten Erkenntnissen wurden weitere Varianten des Drallerzeugers (siehe Tab. 4.1) getestet. Dabei sollte zum einen durch die Veränderung des Winkels auf 25° bzw. 0° der Drall verringert und zum anderen durch die Verwendung von zwei gegenläufigen Drallerzeugern der entstehende Drall aufgehoben werden. Auf die Gefahr hin, die Rezirkulationszone im Mischrohr auch mit den geänderten Varianten nicht unterbinden zu können, wurde hier der erste Micro-Mixer mitsimuliert. Zudem wurde bei diesen Simulationen erstmals eine poröse Zone, welche den Katalysator darstellen soll eingesetzt. Durch diese poröse Zone werden Strömungen in tangentialer und radialer Richtung unterbunden sowie ein Druckverlust ( $\Delta p$ ) generiert. In einer ersten Abschätzung wurde hier ein Wert von  $\Delta p = 50$  mbar angenommen. Die poröse Zone hat eine Länge von 30 mm und ist 100 mm nach dem Drallerzeuger positioniert.

In Tab. 4.5 sind zur Auswertung dieser Simulationen die Uniformity Indizes angeführt. Die Abstandsangaben in der linken Spalte beschreiben dabei die Z-Position der Schnittebene. Zum Vergleich scheinen hier auch die Werte für den 50° Drallerzeuger aus der ersten Simulation, wo noch keine poröse Zone inkludiert war, auf. Betrachtet man den flächengewichteten Uniformity Index ist zu erkennen, dass sich mit abnehmendem Winkel des Drallerzeugers die Durchmischung verschlechtert. Auch die beiden Varianten mit zwei entgegengesetzten Drallerzeugern weisen eine schlechtere Homogenität auf. Einzig der Micro-Mixer kann relativ gut mit den Ergebnissen des 50° und 25° Drallerzeugers mithalten.

Vergleicht man die massengewichteten Uniformity Indizes ergibt sich ein gegensätzliches Ergebnis. Die Drallerzeuger mit 50° bzw. 25° ergeben hier mit Abstand die schlechtesten Werte. Dies kann in diesem Fall auf die ungleichmäßige Geschwindigkeitsverteilung bzw. die Rückströmung im Mischrohr zurückgeführt werden. Die Werte bei 0° Einströmwinkel liegen, wie schon bei dem flächengewichteten Uniformity Index, im Mittelfeld. Die Variante mit zwei Drallerzeugern führt zu relativ guten Ergebnissen, wobei der Micro-Mixer hier am besten abschneidet. Erst wenn die

Strömung nach 100mm auf die poröse Zone auftrifft und dadurch die tangentialen und radialen Bewegungen unterbunden werden, können die Drallerzeuger den Micro-Mixer überbieten. Bei dem 50° Drallerzeuger tritt dieser Effekt, durch das fehlen dieser Zone, nicht auf.

Uniformity Index	Drallerzeuger					Mixer
	50°	25°	0°	2x 50°	2x 25°	
<b>flächengewichtet</b>						19-3-4-05
40mm	0,9863	0,992	0,948	0,986	0,961	0,990
70mm	0,9989	0,998	0,962	0,989	0,984	0,996
100mm	0,9996	0,9998	0,973	0,991	0,991	0,997
<b>massengewichtet</b>	50°	25°	0°	2x 50°	2x 25°	19-3-4-05
40mm	0,654	0,737	0,823	0,773	0,870	0,881
70mm	0,658	0,747	0,835	0,903	0,905	0,927
100mm	0,712	0,918	0,972	0,987	0,986	0,951

**Tabelle 4.5:** Uniformity Index für die verschiedenen Drallerzeugergeometrien und einem Micro-Mixer

In *Tab. 4.6* sind noch die Drallzahl sowie der Druckverlust für die einzelnen Geometrien ausgewiesen. Auffällig ist, dass sich nur beim Drallerzeuger mit 50° eine erwähnenswerte Drallzahl errechnet. Allerdings liegt auch diese unter jenem Wert, der bei den Experimenten von Nazari (2011)[24] ermittelt wurde. Dort konnte bei 50° eine Drallzahl von 1,29 festgestellt werden. Möglicherweise liegt dies an dem geringen Abströmquerschnitt des Mischrohres, wodurch der Axialimpuls sehr hoch gehalten wird.

Bei den Druckverlustwerten wurden die 50 mbar, die den Systemen durch die porösen Zone aufgeprägt wurden, abgezogen. Dadurch können alle Simulationen miteinander verglichen werden. Es ist ersichtlich, dass mit sinkendem Schaufelwinkel der Drallerzeuger ebenfalls der Druckverlust im System sinkt. Bemerkenswert ist vor allem der niedrige Wert des Micro-Mixers.

Parameter	Drallerzeuger					Mixer
	50°	25°	0°	2x 50°	2x 25°	
Drallzahl $S_N$	0,74	0,02	0,02	0,02	0,006	-
$\Delta p$ [mbar]	75	59	39	60	56	9

**Tabelle 4.6:** Drallzahl und Druckverlust für die verschiedenen Drallerzeugergeometrien und einen Micro-Mixer

Als letzte Grafik zur Bewertung der Simulationen sind in *Abb. 4.12* die axialen Geschwindigkeitsprofile der einzelnen Geometrien, mit Ausnahme des 50° Drallerzeugers (*Abb. 4.11*), ausgewiesen. Im Gegensatz zu den Ergebnissen aus der ersten Simulation sind hier zumindest keine Bewegungen entgegen der Strömungsrichtung mehr feststellbar. Die besten Ergebnisse werden hier durch den Micro-Mixer sowie durch die Variante mit 2x 25° erzielt.

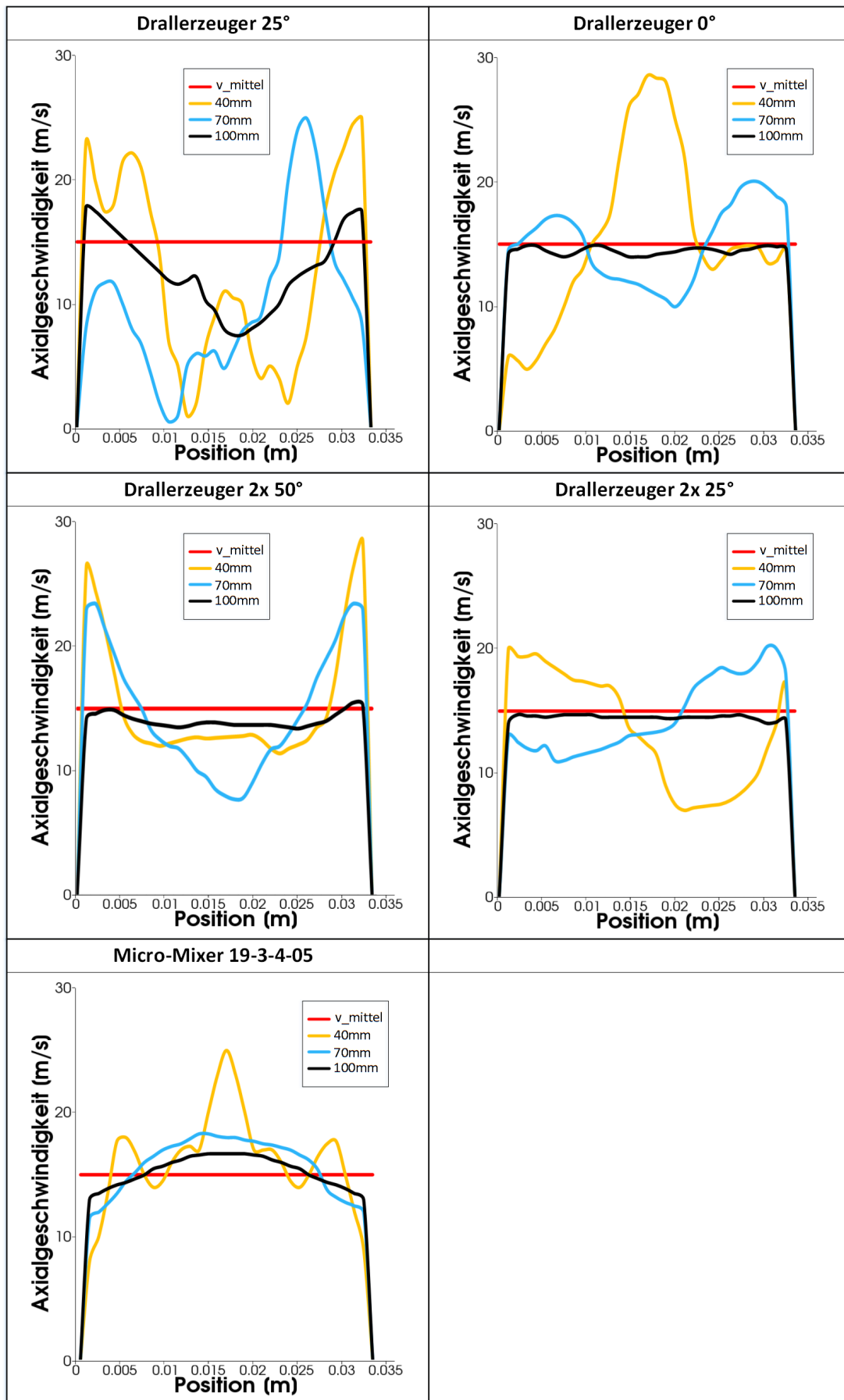


Abbildung 4.12: Axiales Geschwindigkeitsprofil für die verschiedenen Drallerzeugergeometrien und einen Micro-Mixer

Bei allen anderen Varianten stellt sich erst nach 100 mm, wo die poröse Zone positioniert ist, ein anschauliches Geschwindigkeitsprofil ein. Leider kann das Profil an dieser Position nur bedingt zur Bewertung herangezogen werden, da, wie sich später herausstellte, der Druckverlust um ein vielfaches zu hoch angetragen wurde. Details siehe *Kap. 4.6*

#### 4.5.1 Fazit

Zusammenfassend aus den obigen Ergebnissen kann man sagen, dass sich die Drallerzeugerkonfigurationen mit nur einem Drallerzeuger grundsätzlich sehr gut für die Durchmischung zweier Massenströme eignen. Allerdings entspricht die dabei entstehende Strömung nicht dem gewünschten Profil. Bei den beiden Varianten mit je zwei Drallerzeugern konnte ein entgegengesetztes Verhalten festgestellt werden. Hier fallen die Ergebnisse für die Durchmischung eher schlecht aus. Als Gesamtkonzept hat sich herauskristallisiert, dass der Micro-Mixer die Anforderungen an den Mischer am Besten erfüllt. Hier wurden bei allen Bewertungskriterien sehr gute Resultate ermittelt und daher beschränken sich die weiteren Simulationen auf diese Geometrie.

## 4.6 Resultate der Micro-Mixer-Simulation

Wie bei den Drallerzeugern wurde auch hier eine erste Ausarbeitung der Ergebnisse durch die Firma SES-Tec durchgeführt. Davon ausgenommen sind die Resultate in *Kap. 4.6.5* welche rein vom Autor erstellt wurden. Wiederum wurden auch hier, zur besseren Veranschaulichung, sämtliche visuellen Ergebnisse neuerlich vom Verfasser der Arbeit ausgewertet. Die berechneten Uniformity Indizes wurden von der Firma SES-Tec übernommen.

Ähnlich wie bei den Drallerzeugern wurde auch bei den Micro-Mixer-Simulationen eine poröse Zone zur Darstellung des Katalysators genutzt. Hier konnte bei der Fa. Heraeus in Erfahrung gebracht werden, dass die Katalysatoren mit den axialen Zellen nur einen sehr geringen Druckverlust aufweisen. Entgegen der ersten Abschätzungen von  $\Delta p = 50$  mbar, wie bei den Drallerzeugern angenommen, wurde bei den folgenden Simulationen nur ein geringer Druckverlust von  $\Delta p = 1,8$  mbar gewählt. Im Rahmen dieser Untersuchungen sollte sich die poröse Zone, wie bei den Drallerzeugersimulationen, 100 mm nach dem Austritt aus der Mischapparatur befinden. Durch ein Missgeschick beim Aufsetzen des Rechengitters wurde diese allerdings auf 90 mm sowie bei den Micro-Mixer-Simulationen mit den kegeligen Düsen und den 0,5 mm Wasserstoffinjektionslöchern auf 50 mm nach dem Austritt positioniert. Bei einer detaillierten Untersuchung der Position der porösen Zone, wie in *Kap. 4.6.2* beschrieben, konnten allerdings durch den geringen Druckverlust nur sehr geringe Beeinflussungen festgestellt werden.

Auch hier wurde wiederum mit den Simulationen unter Betriebspunkt 5 (siehe *Tab. 4.3*) gestartet. Nachfolgend wurden die Untersuchungen hinsichtlich der Position der porösen Zone sowie der weiteren Betriebspunkte durchgeführt. Um einen anschaulichen Überblick der Resultate zu erhalten, wurden die Ergebnisse für alle Betriebspunkte zusammengefasst und in folgende Kategorien aufgeteilt: Strömungsverhaltens im Micro-Mixer, die Einflüsse der Position der porösen Zone, die Homogenität der Mischung und die axialen Strömungsprofile im Mischrohr. Um die Gleichmäßigkeit der Wasserstoffversorgung für die 19 Düsen zu prüfen, wurden abschließend für einzelne Micro-Mixer noch die Massenströme durch die  $H_2$ -Injektionslöcher ausgewertet.

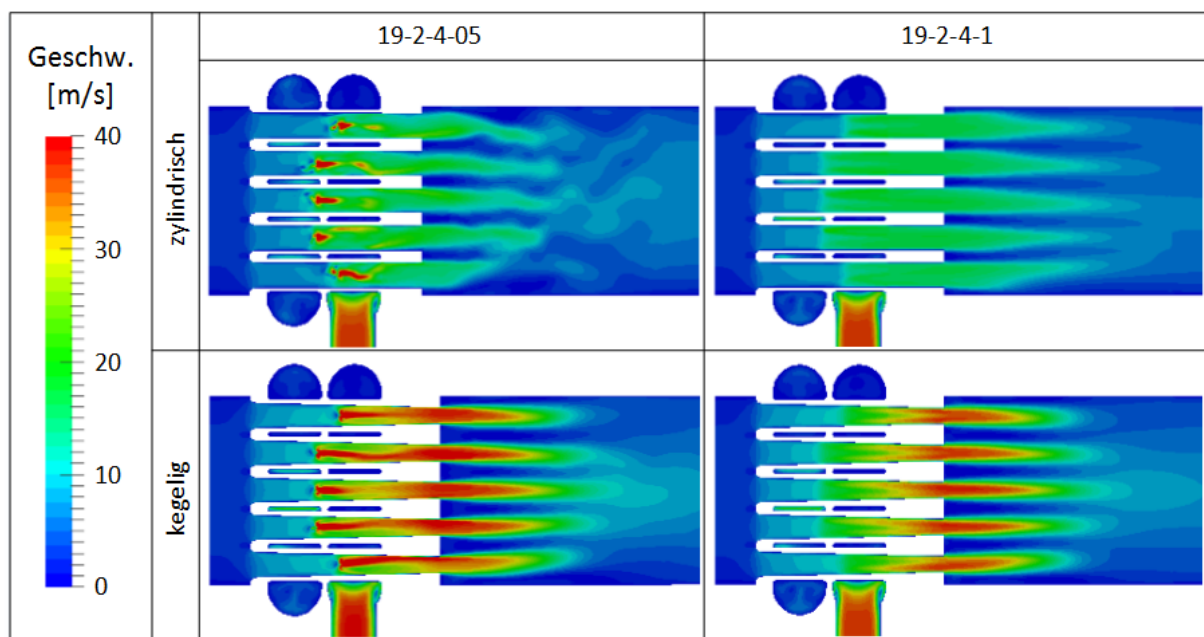


### 4.6.1 Strömungsverhalten im Micro-Mixer

Zu Beginn wird das Strömungsverhalten im inneren des Micro-Mixers bzw. beim Eintritt in das Mischrohr beschrieben. Dazu werden im folgenden Farbplots mit der Geschwindigkeitsverteilung, der  $H_2$ -Massenverteilung sowie der Druckverteilung präsentiert.

In *Abb. 4.13* sind die Geschwindigkeitsverteilungen bei Betriebspunkt 1, wo eine mittlere Geschwindigkeit von 5 m/s im Mischrohr herrschen soll, für verschiedene Micro-Mixer-Varianten zu sehen. Diese unterscheiden sich hinsichtlich der Düsenform (zylindrisch, kegelig) und dem Durchmesser der  $H_2$ -Injektionslöcher. Wie bei einem Vergleich der Bilder festgestellt werden kann, entstehen hier die größten Geschwindigkeiten zum einen durch die Verwendung von 0,5 mm Wasserstofffeindüsen und zum anderen durch die kegeligen Düsen. Bei den 1,0 mm Injektionslöchern sind keine erhöhten Eintrittsgeschwindigkeiten bezogen auf die Strömungsgeschwindigkeit in der Düse festzustellen. Des Weiteren werden durch die kegeligen Düsen Geschwindigkeiten bis zu 40 m/s beim Eintritt in das Mischrohr erreicht. Dadurch sollte es nicht mehr zu einer Rückzündung in den Micro-Mixer kommen.

Bei BP 2 und 3 ergeben sich durch die gleiche mittlere Geschwindigkeit im Mischrohr wie bei BP 1 auch sehr ähnliche Geschwindigkeitsverteilungen. Daher sind diese Plots nicht explizit dargestellt.



**Abbildung 4.13:** Geschwindigkeitsverteilung im Micro-Mixer bei BP 1

Weitaus höhere Geschwindigkeiten im Micro-Mixer werden bei den Betriebspunkten 4 und 5, wie in *Abb. 4.14* zu sehen, erreicht. Bei BP 4, wo eine mittlere Geschwindigkeit von 30 m/s im Mischrohr vorgesehen ist, entstehen schon bei den zylindrischen Düsen Geschwindigkeiten bis zu 100 m/s. Gleiches gilt für die kegeligen Düsen bei BP 5 (15 m/s im Mischrohr). Lediglich bei der Abbildung links unten sind moderate Geschwindigkeiten ersichtlich. Auf Grund dieser Erkenntnisse empfiehlt sich bei diesen Betriebspunkten lediglich die Verwendung der zylindrischen Micro-Mixer.

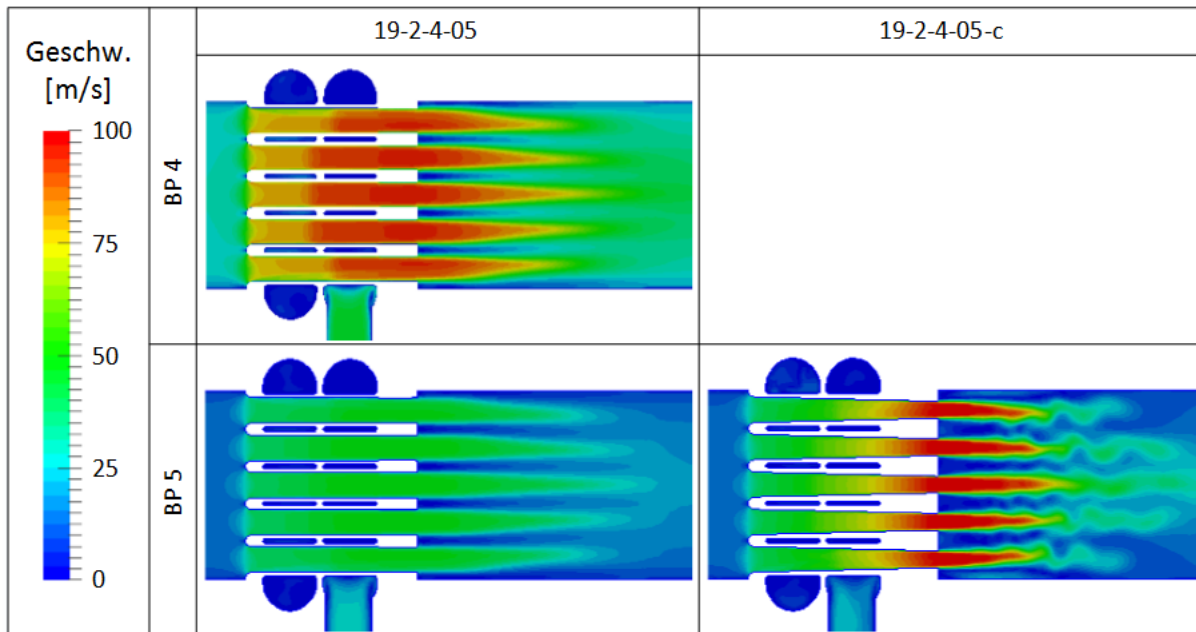


Abbildung 4.14: Geschwindigkeitsverteilung im Micro-Mixer bei BP 4 und BP 5

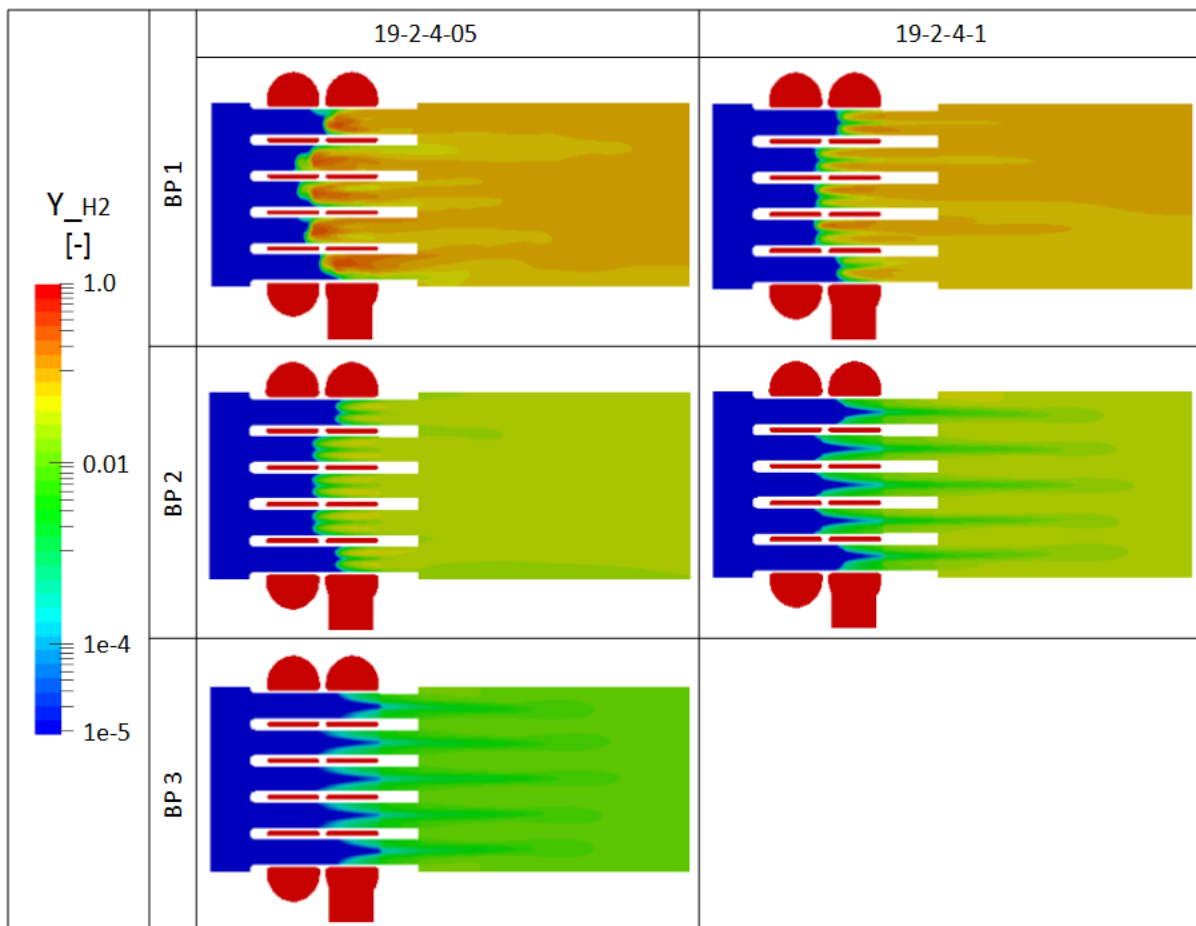


Abbildung 4.15: Wasserstoffmassenverteilung im Micro-Mixer

In *Abb. 4.15* ist die Wasserstoffmassenverteilung für Betriebspunkt 1, 2 und 3 dargestellt. Zusätzlich wird wiederum zwischen 0,5 mm und 1,0 mm Wasserstoffinjektionslöchern unterschieden. Durch die verschiedenen Verbrennungsluftverhältnisse der einzelnen Betriebspunkte ergeben sich, wie der Name schon sagt, unterschiedliche Verhältnisse zwischen Brennstoff- und Verbrennungsluftmassenstrom. Das führt in weiterer Folge auch zu unterschiedlichen Impulsverhältnissen der einzelnen Ströme. Bei BP 1, wo das Verhältnis von Brennstoffimpuls zum Luftimpuls am größten ist, kann, bei der Verwendung der 0,5 mm Injektionslöchern, ein Rückströmen des Wasserstoffs entgegen der Flussrichtung in der Düse festgestellt werden. Der Wasserstoffstrahl platzt beim Eintritt in die Düse auf bzw. stoßen die Ströme der vier Bohrungen in der Mitte der Düse zusammen und somit entsteht diese Rückströmung. Durch die Vergrößerung des Einströmquerschnitts und die daraus resultierende Geschwindigkeitssenkung wird der Impuls des eintretenden Wasserstoffs gemindert und somit das Rückströmen entgegen der Flussrichtung unterbunden. Ein ähnliches Verhalten ist auch bei Betriebspunkt 2 zu erkennen. Bei BP 3 wird der Wasserstoff bereits bei den kleinen Injektionslöchern sofort durch den großen Impuls der Verbrennungsluft mitgerissen.

Bei Betriebspunkt 4 und 5 ist durch das gleiche  $\lambda$  wie bei BP 3 auch das Impulsverhältnis des Brennstoffs und der Luft identisch und es ergibt sich somit eine einheitliche Wasserstoffmassenverteilung.

In *Abb. 4.16* ist die Druckverteilung für verschiedene Betriebspunkte, Düsenformen und  $H_2$ -Injektionslöcher dargestellt. Das linke obere Bild zeigt dabei die Konfiguration mit zylindrischen Düsen, 0,5 mm Wasserstoffbohrungen und einem fetten Verbrennungsluftverhältnis ( $\lambda = 0,33$ ). Es ist zu erkennen, dass sich durch den hohen Wasserstoffimpuls beim Eintritt in die Düse Unterdruckbereiche bilden. Des Weiteren ist an dieser Stelle ebenfalls ein sehr großer Druckverlust zu verzeichnen. Der Überdruck in der Versorgungskammer beträgt beinahe 2000 Pascal. Allerdings wurde, um auch kleinere Druckunterschiede identifizieren zu können, der Darstellungsbereich nicht in dieser Größenordnung gewählt.

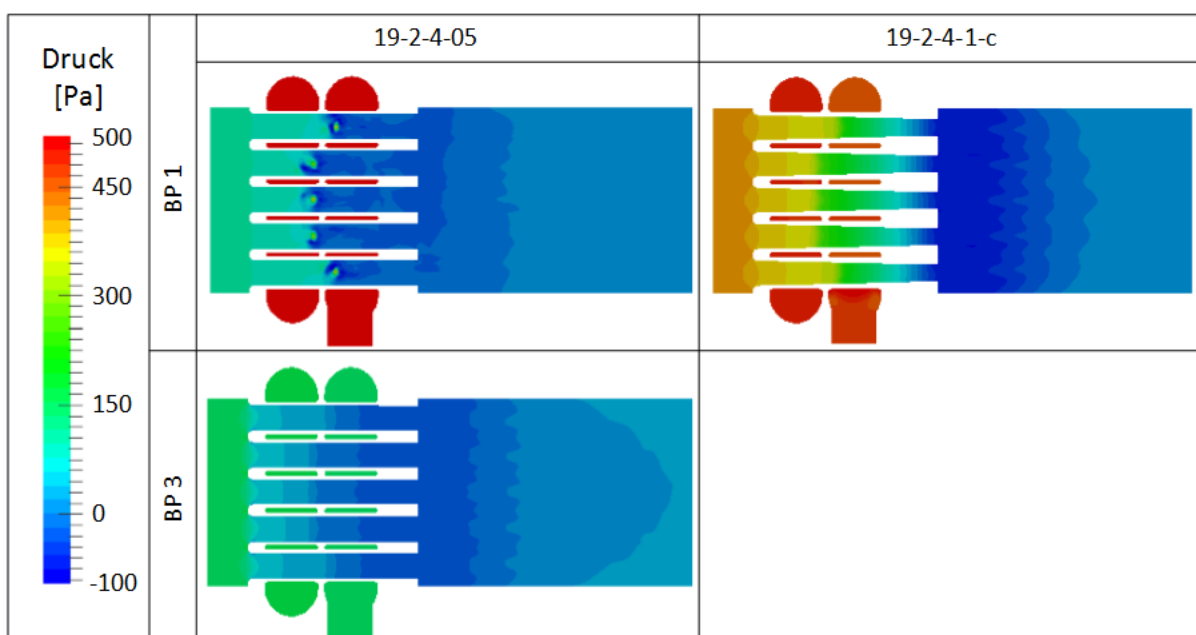


Abbildung 4.16: Druckverteilung im Micro-Mixer

Verglichen dazu liegt der Überdruck in der Versorgungskammer bei der rechten Abbildung, wo 1,0 mm Löcher verwendet werden, bei 450 – 500 Pa. Weiters ist auf den rechten Bild durch die kegeligen Düsen ein Druckanstieg in der Luftversorgungsleitung sowie im Vergleich zu den zylindrischen Düsen ein starkes Unterdruckgebiet beim Eintritt in das Mischrohr ersichtlich. Bei Betriebspunkt 3 sind die Druckverluste für die Wasserstoffeindüsung sowie für die gesamte Strömung durch den Mixer annähernd gleich.

Bei den Betriebspunkten 4 und 5, welche hier nicht bildlich dargestellt sind, steigen die Druckverluste durch die größeren Massenströme natürlich entsprechend.

#### 4.6.2 Position der porösen Zone

Der Einfluss auf die Durchmischung durch die Position der porösen Zone wurde bei BP 5 sowie einer Micro-Mixer-Konfiguration mit zylindrischen Düsen und 0,5 mm  $H_2$ -Injektionslöchern durchgeführt. Da hier visuell keine merklichen Unterschiede auszumachen waren, werden diese Ergebnisse anhand der Uniformity Indizes beurteilt.

In *Tab. 4.7* sind die flächengewichteten Uniformity Indizes ausgewiesen. Die grau hinterlegten Zellen markieren dabei jene Werte, bei denen sich die zur Berechnung genutzte Querschnittsfläche bereits in bzw. nach der porösen Zone befindet. Vergleicht man die einzelnen Werte bei den verschiedenen Positionen in Z-Richtung, sind kaum Unterschiede auszumachen. Erst in der dritten Nachkommastelle sind vereinzelt Änderungen festzustellen. Durch diese Werte können auch die geringen Unterschiede bei der visuellen Darstellung der Ergebnisse belegt werden.

Flächengewichteter Uniformity Index	Z-Position der porösen Zone[mm]			
	30	40	50	90
Z-Position [mm]				
20	0,959	0,959	0,959	0,959
30	0,987	0,986	0,987	0,987
40	0,995	0,995	0,995	0,995
50	0,996	0,997	0,996	0,997
60	0,997	0,997	0,997	0,998
90	0,998	0,998	0,998	0,998

**Tabelle 4.7:** Flächengewichteter Uniformity Index bei verschiedenen Positionen der porösen Zone

Entgegen der Ergebnisse aus der obigen Tabelle sind in *Tab. 4.8* merkliche Veränderungen durch die Variation der Position der porösen Zone erkennbar. In dieser Tabelle sind die massengewichteten Uniformity Indizes ausgewiesen. Bei den Werten, welche direkt am Eintritt in den "Katalysator" berechnet werden, ist jeweils eine merkliche Verbesserung gegenüber den vorhergegangenen sowie den restlichen Werten bei gleicher Z-Position festzustellen. Da die Durchmischung die Wasserstoffmassenverteilung, wie oben festgestellt, nicht variiert, kann dieses Verhalten auf die Angleichung der Strömungsgeschwindigkeit zurückgeführt werden.

Massengewichteter Uniformity Index	Z-Position der porösen Zone [mm]			
Z-Position [mm]	30	40	50	90
20	0,842	0,837	0,840	0,840
30	0,941	0,889	0,885	0,894
40	0,953	0,944	0,916	0,916
50	0,959	0,965	0,954	0,926
60	0,960	0,970	0,963	0,932
90	0,959	0,969	0,971	0,967

**Tabelle 4.8:** Massengewichteter Uniformity Index bei verschiedenen Positionen der porösen Zone

Aufgrund dieser Resultate ist zu erkennen, dass die Position der porösen Zone zwar einen geringen, gleichwohl merkbaren Einfluss hat.

#### 4.6.3 Homogenität der Mischung

In diesem Kapitel wird die Homogenität der Mischung für die diversen Betriebspunkte und unter Verwendung verschiedener Micro-Mixer-Konfigurationen ermittelt. Dazu wird das Verbrennungsluftverhältnis sowie die Uniformity Indizes an mehreren Positionen in axialer Richtung nach dem Micro-Mixer ausgewertet. Bei den Farbplots wurden die Wertebereiche dahingehend gewählt, dass eine aussagekräftige Interpretation der Ergebnisse für alle Konfigurationen durchgeführt werden kann. Das heißt allerdings, dass bei einzelnen Abbildungen die Werte durchaus noch über oder unter dem gewählten Bereich liegen können.

In *Abb. 4.17* sind die Farbplots für das Verbrennungsluftverhältnis bei Betriebspunkt 1 dargestellt. Hier beträgt der Sollwert  $\lambda = 0,33$ . Die besten Ergebnisse werden hier durch den Micro-Mixer mit den 0,5 mm  $H_2$ -Injektionslöchern und einer kegeligen Düsenform erreicht. Allerdings werden auch durch die Mixer 19-2-4-05 und 19-2-4-1-c sehr ansprechende Resultate erzielt. Lediglich die Variante mit den zylindrischen Düsen und den 1,0 mm  $H_2$ -Löchern zeigt eine etwas geringere Homogenität. Auffällig ist hier, dass bei den Konfigurationen mit den 1,0 mm Wasserstoffinjektionslöchern im unteren Bereich ein geringerer Brennstoffmassenanteil vorliegt. Dies kann auf eine geringe Inhomogenität bei der Eindüsung der Wasserstoffmassenströme zurückgeführt werden. Details dazu siehe *Kap. 4.6.5*

Die Resultate für den Betriebspunkt 2 sind in *Abb. 4.18* dargestellt. Wiederum wird durch den Micro-Mixer 19-2-4-05-c die beste Homogenität über den Querschnitt erreicht. Dicht gefolgt von den weiteren Konfigurationen. In diesem Fall ist beim Micro-Mixer 19-2-4-05 ein erhöhter  $\lambda$ -Wert im unteren Bereich zu erkennen.

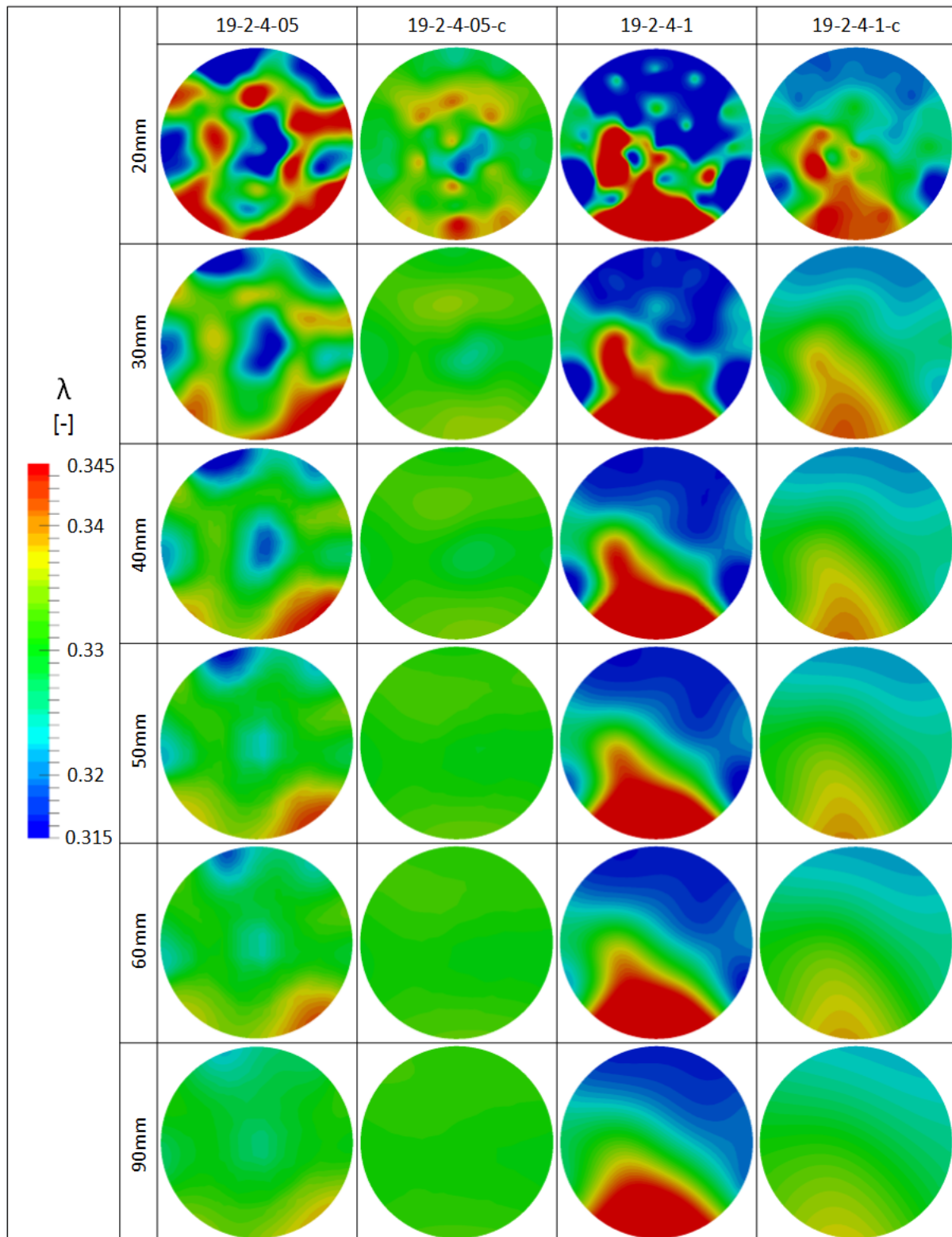


Abbildung 4.17: Verbrennungsluftverhältnis bei Betriebspunkt 1

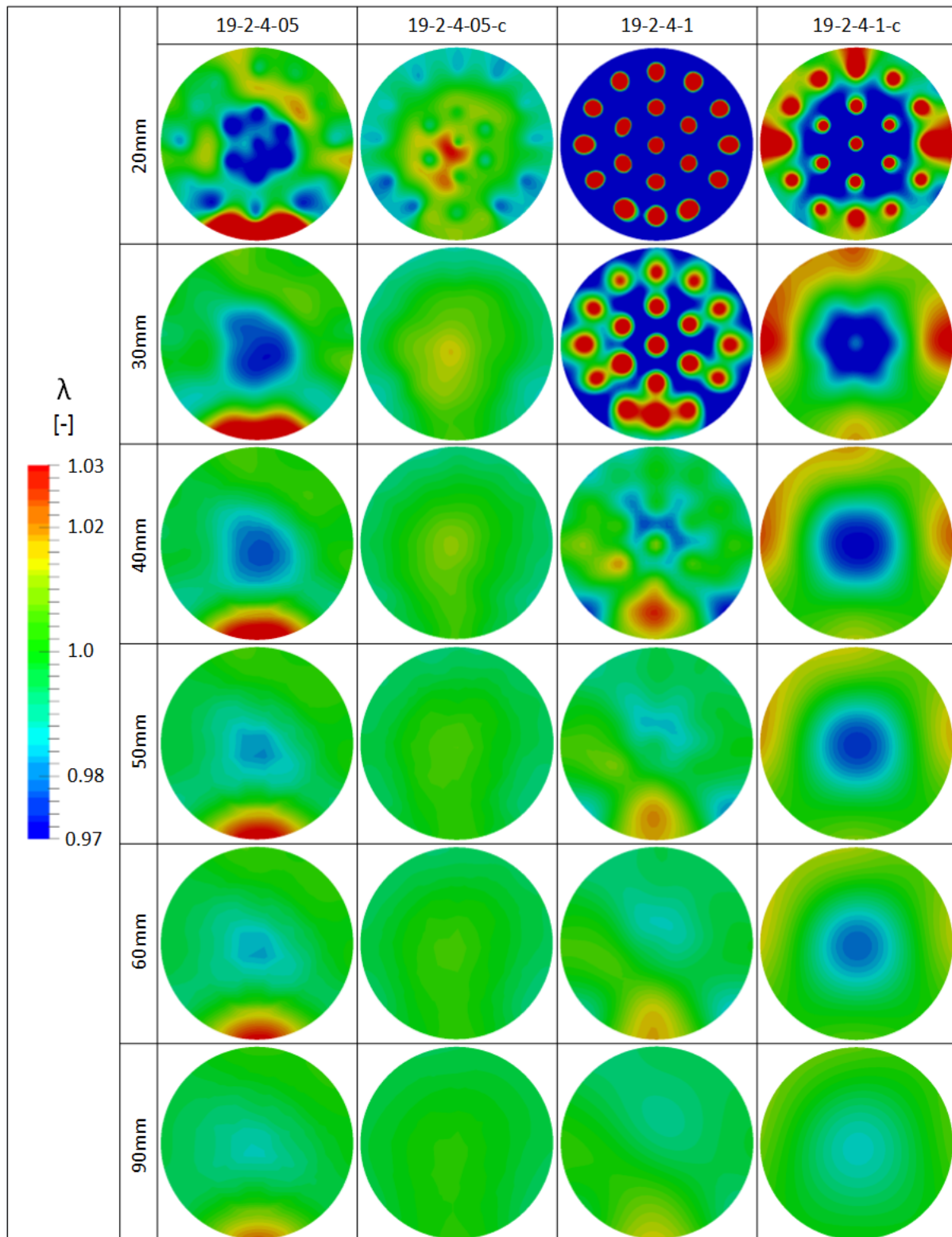


Abbildung 4.18: Verbrennungsluftverhältnis bei Betriebspunkt 2

Durch die Betrachtung der erste Zeile bei  $Z=20$  mm können sehr interessante Erkenntnisse über das Strömungsverhalten gewonnen werden. Wie bereits in *Kap. 4.6.1* beschrieben, entstehen durch die unterschiedlichen Betriebspunkte sowie durch die verschiedenen  $H_2$ -Injektionsloch-



durchmesser auch unterschiedliche Verhältnisse zwischen Wasserstoff- und Verbrennungsluftimpuls. Bei den 0,5 mm Mixern ist der Eintrittsimpuls des Wasserstoffs noch so groß, dass sich bereits in der Düse des Micro-Mixers eine bessere Durchmischung gegenüber den Varianten mit 1,0 mm Löchern ergibt. Daher ist in diesem Fall bereits nach 20 mm eine ansehnliche Durchmischung festzustellen. Bei den 1,0 mm Konfigurationen kann der Wasserstoff bei der Eindüsung nicht so tief in den Luftmassenstrom eindringen und benötigt daher etwas länger für die Durchmischung. Dieses Verhalten ist sehr gut beim Micro-Mixer 19-2-4-1 zu sehen. Beim 19-2-4-1-c Mixer tritt zusätzlich noch ein weiterer Effekt in Erscheinung. Vor allem in der Mitte des Mischrohres herrscht aufgrund der kegeligen Düsen eine erhöhte Strömungsgeschwindigkeit. Da die Dichte des Gases annähernd konstant angenommen werden kann und in weiterer Folge die Kontinuitätsgleichung erfüllt werden muss, entsteht in Wandnähe eine geringere Strömungsgeschwindigkeit. Dadurch ist auch in diesem Bereich bereits nach 20 mm eine bessere Durchmischung, verglichen mit Micro-Mixer 19-2-4-1, zu erkennen.

In den nächsten beiden Abbildungen (*Abb. 4.19* und *Abb. 4.20*) werden die Resultate für Betriebspunkt 3, 4 und 5 präsentiert. Hier herrscht ein mageres Verbrennungsluftverhältnis mit einem Sollwert von  $\lambda = 3,0$  im Mischrohr. Es ist zu erkennen, dass die kegeligen Mixer durch die hohe Strömungsgeschwindigkeit in der Mischrohrmitte eine verhältnismäßig schlechte Durchmischung aufweisen. Zusätzlich ist hier trotz der 0,5 mm  $H_2$ -Injektionslöcher ein ähnliches Verhalten der Durchmischung, 20 mm bzw. 30 mm nach dem Austritt aus dem Micro-Mixer, wie bei Betriebspunkt 2 zu erkennen. Dies ist auf die geänderten Brennstoff- und Luftmassenströme und die daraus resultierenden Impulse zurückzuführen. Vergleicht man Mixer 19-2-4-05 und 19-3-5-05 bei Betriebspunkt 5 ist ersichtlich, dass die Position der Wasserstoffinjektionslöcher einen relevanten Einfluss auf die Durchmischung hat. Wie bereits in *Kap. 4.2.1* erläutert, werden bei dem Mixer mit drei Wasserstoffhauptversorgungsanschlüssen die mittleren 7 Düsen durch die rechte Versorgungskammer (*Abb. 4.4*), wodurch eine kürzere Distanz zum Mischrohereintritt entsteht, versorgt.

Nachfolgend sind in *Tab. 4.9* die flächen- und massengewichteten Uniformity Indizes für die einzelnen Betriebspunkte bei unterschiedlichen Micro-Mixer-Geometrien angeführt. Zusätzlich wurde hier die prozentuale Verbesserung der einzelnen Werte, wenn die Mischrohlänge jeweils um eine Schnittebene verlängert wird, ermittelt. Die Verbesserung bezieht sich dabei auf den vorangegangenen Wert. Betrachtet man die flächengewichteten Uniformity Indizes bei Betriebspunkt 1 sind, korrelierend mit den Ergebnissen der Plots für das Verbrennungsluftverhältnis, beim Mixer 19-2-4-05-c die besten sowie beim Mixer 19-2-4-1 die schlechtesten Werte ausfindig zu machen. In dieser Tabelle sind noch die Ergebnisse für eine weitere Variante, dem Micro-Mixer 19-2-4-1-c-neu, ausgewiesen. Hier wurde aus konstruktiven Gründen die Position der  $H_2$ -Hauptversorgungsleitung, durch welche der Wasserstoff für die inneren Düsen eingebracht wird, geändert. Details dazu siehe *Kap. 4.6.5*. Hier ist nur eine unwesentliche Verbesserung gegenüber dem Micro-Mixer 19-2-4-1-c erkennbar. Auch bei den Farbplots, welche hier nicht dargestellt werden, konnten keine wesentlichen Unterschiede ausgemacht werden. Bei den restlichen Betriebspunkten sind hier ebenfalls die gleichen Verhaltensweisen wie beim Verbrennungsluftverhältnis für den flächengewichteten Uniformity Index festzustellen.



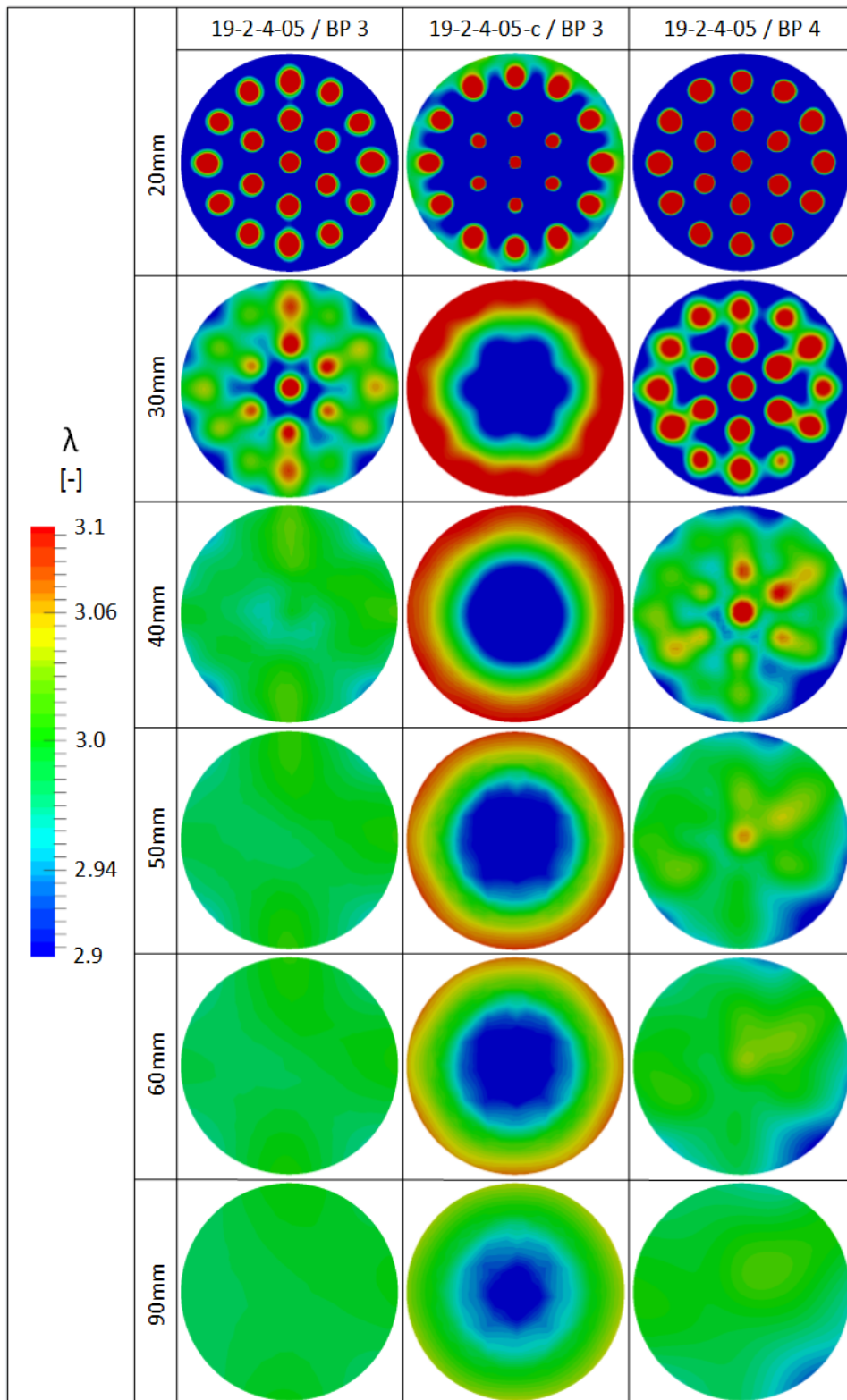


Abbildung 4.19: Verbrennungsluftverhältnis bei Betriebspunkt 3 und 4

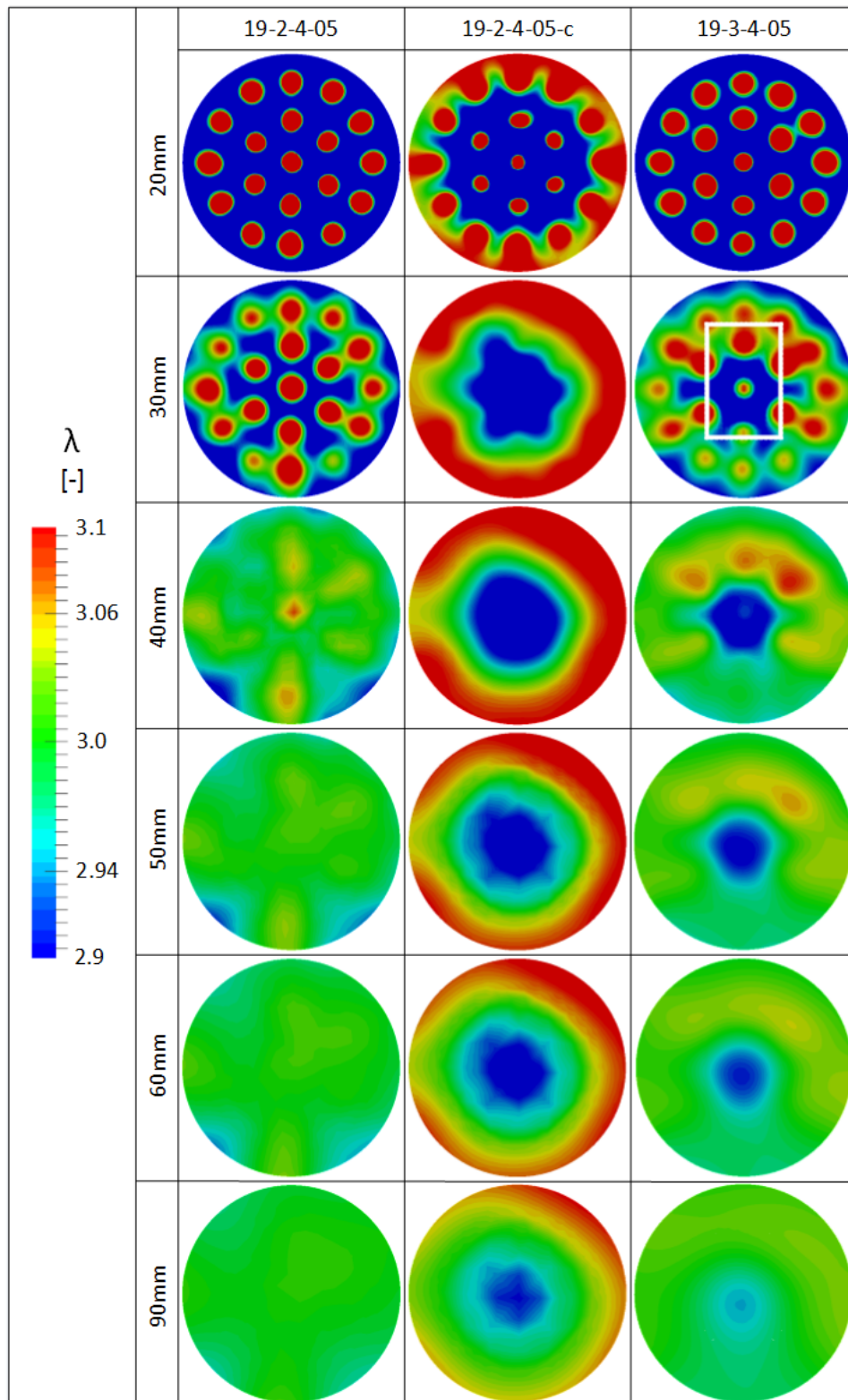


Abbildung 4.20: Verbrennungsluftverhältnis bei Betriebspunkt 5

Uniformity Index	Betriebspunkt 1					Betriebspunkt 2					BP 4	BP 5
	-05	-05-c	-1	-1-c	-1-c-neu	-05	-05-c	-1	-1-c	-05-c		
<b>Flächengewicht</b>	<b>Micro-Mixer 19-2-4...</b>											
<b>Z-Position [mm]</b>	-05	-05-c	-1	-1-c	-1-c-neu	-05	-05-c	-1	-1-c	-05-c	-05	-05
20	0,987	0,995	0,978	0,991	0,993	0,993	0,996	0,966	0,987	0,976	0,967	0,953
30	0,992	0,997	0,981	0,992	0,994	0,995	0,997	0,989	0,994	0,994	0,984	0,983
40	0,994	0,998	0,983	0,993	0,995	0,996	0,998	0,996	0,995	0,998	0,987	0,995
50	0,995	0,9987	0,984	0,994	0,996	0,997	0,998	0,997	0,996	0,9985	0,988	0,997
60	0,996	0,9989	0,985	0,994	0,996	0,997	0,998	0,997	0,996	0,9988	0,990	0,997
90	0,997	0,9992	0,987	0,995	0,997	0,998	0,999	0,998	0,998	0,9999	0,994	0,998
<b>Verbesserung [%]</b>												
20 – 30	0,5	0,2	0,3	0,1	0,1	0,2	0,1	2,3	0,7	1,8	1,7	3,0
30 – 40	0,2	0,1	0,2	0,1	0,1	0,1	0,1	0,7	0,1	0,4	0,3	1,2
40 – 50	0,1	0,07	0,1	0,1	0,1	0,1	0	0,1	0,1	0,05	0,1	0,2
50 – 60	0,1	0,02	0,1	0	0	0	0	0	0	0,03	0,2	0
60 – 90	0,1	0,03	0,2	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,2	0,1	0,4	0,1
<b>Massengewicht</b>	<b>Micro-Mixer 19-2-4...</b>											
<b>Z-Position [mm]</b>	-05	-05-c	-1	-1-c	-1-c-neu	-05	-05-c	-1	-1-c	-05-c	-05	-05
20	0,829	0,659	0,804	0,687	0,681	0,852	0,635	0,778	0,676	0,821	0,650	0,849
30	0,876	0,859	0,896	0,886	0,878	0,929	0,816	0,873	0,873	0,926	0,857	0,902
40	0,877	0,885	0,924	0,902	0,897	0,953	0,838	0,909	0,896	0,959	0,875	0,925
50	0,884	0,936	0,929	0,911	0,907	0,969	0,918	0,919	0,908	0,976	0,943	0,935
60	0,895	0,947	0,927	0,917	0,913	0,966	0,937	0,924	0,917	0,978	0,957	0,941
90	0,943	0,949	0,951	0,957	0,959	0,961	0,932	0,959	0,963	0,972	0,964	0,969
<b>Verbesserung [%]</b>												
20 – 30	4,7	20,0	9,2	19,9	19,7	7,7	18,1	9,5	19,7	10,5	20,7	5,3
30 – 40	0,1	2,6	2,8	1,6	1,9	2,4	2,2	3,6	2,3	3,3	1,8	2,3
40 – 50	0,7	5,1	0,5	0,9	1,0	1,6	8,0	1,0	1,2	1,7	6,8	1,0
50 – 60	1,1	1,1	-0,2	0,6	0,6	-0,3	1,9	0,5	0,9	0,2	1,4	0,6
60 – 90	4,8	0,2	2,4	4,0	4,6	-0,5	-0,5	3,5	4,6	-0,6	0,7	2,8

**Tabelle 4.9:** Uniformity Indizes für alle Betriebspunkte und verschiedene Micro-Mixer-Varianten

Betrachtet man die massengewichteten Uniformity Indizes ist zu erkennen, dass die Konfigurationen mit den 1,0 mm  $H_2$ -Injektionslöchern bei Betriebspunkt 1 sehr gute Ergebnisse erzielen. Bei den mageren Betriebspunkten (BP 3, 4 und 5) werden aufgrund des Massenstromverhältnisses zwischen Brennstoff und Luft nur 0,5 mm  $H_2$ -Löcher verwendet. Auch hier sind sehr ansprechende Resultate zu sehen. Bei genauerer Betrachtung der Konfigurationen mit 0,5 mm  $H_2$ -Injektionslöchern und kegeligen Düsen ist jeweils 50 mm nach dem Eintritt in das Mischrohr eine deutliche Verbesserung der Werte ersichtlich. Dies kann durch die veränderte Position der porösen Zone, welche sich bei diesen Simulationen 50 mm nach dem Micro-Mixer befindet, erklärt werden.

Durch die Betrachtung der prozentualen Verbesserung ist bei beiden Uniformity Indizes ersichtlich, dass sich nach einer Verlängerung der Mischrohlänge auf 40 mm (grau hinterlegt) nur noch sehr geringe Steigerungen ergeben. Lediglich bei den Konfigurationen mit 0,5 mm  $H_2$ -Injektionslöchern und kegeligen Düsen, wie obig beschrieben, kann bei 50 mm nochmals ein Anstieg des massengewichteten Uniformity Index festgestellt werden. Aus den Erkenntnissen in Kap. 4.6.2 wird dieser Effekt auch bei einer Positionierung der porösen Zone 40 mm nach dem Micro-Mixer auftreten und somit kann die benötigte Mischrohlänge, nach einer Beurteilung mit diesen Parametern, mit einer Länge von 40 mm abgeschätzt werden.

#### 4.6.4 Axiales Strömungsprofil

Die axialen Strömungsprofile wurden wie die Parameter zu Verifizierung der Durchmischung an mehreren Z-Positionen im Mischrohr ausgewertet und sollen zur Festlegung der benötigten Mischrohlänge beitragen.

Dazu werden in Abb. 4.21 die Profile für die Betriebspunkte 1 und 3, wo eine mittlere Geschwindigkeit von 5m/s im Mischrohr angenommen wurde, dargestellt. Die unterschiedlichen  $H_2$ -Injektionslochdurchmesser spielen bei diesen Betrachtungen nur eine untergeordnete Rolle. Wie zu sehen ist, sind die Geschwindigkeitsspitzen der einzelnen Düsen 40 mm nach dem Micro-Mixer kaum noch vorhanden. In den beiden oberen Abbildungen kann der Einfluss der Position der porösen Zone erfasst werden. Bei den Ergebnissen im linken Bild befindet sich diese 50 mm und im rechten 90 mm nach Micro-Mixer. Hier ist eine deutliche Angleichung der Geschwindigkeit nach 50 mm durch die poröse Zone zu sehen. Dennoch liegt die Geschwindigkeit in der Rohrmitte noch bei  $\sim 7$  m/s was ein Abweichung von 40% zur mittleren Geschwindigkeit bedeutet. Ein Vergleich zwischen kegeligen und zylindrischen Düsen ist in den unteren beiden Grafen bei Betriebspunkt 3 dargestellt. Hier ist ein deutlicher Unterschied der Profile durch die kegeligen Düsen und die daraus resultierende hohe Eintrittsgeschwindigkeit in das Mischrohr ersichtlich. Vergleicht man die beiden linken Bilder, ist der Einfluss des größeren Luftmassenstroms bei Betriebspunkt 3 zu erkennen. Dadurch steigt die Geschwindigkeit und folglich auch der Impuls bei der Durchströmung des Micro-Mixers. Auch bei der linken unteren Darstellung befand sich die poröse Zone bei der Simulation 50mm nach dem Micro-Mixer. Hier ist wiederum eine entsprechende Angleichung der axialen Geschwindigkeit bei 50 mm festzustellen. An der Position 40 mm nach dem Mixer ist noch eine maximale Geschwindigkeit von knapp 9 m/s zu erkennen.

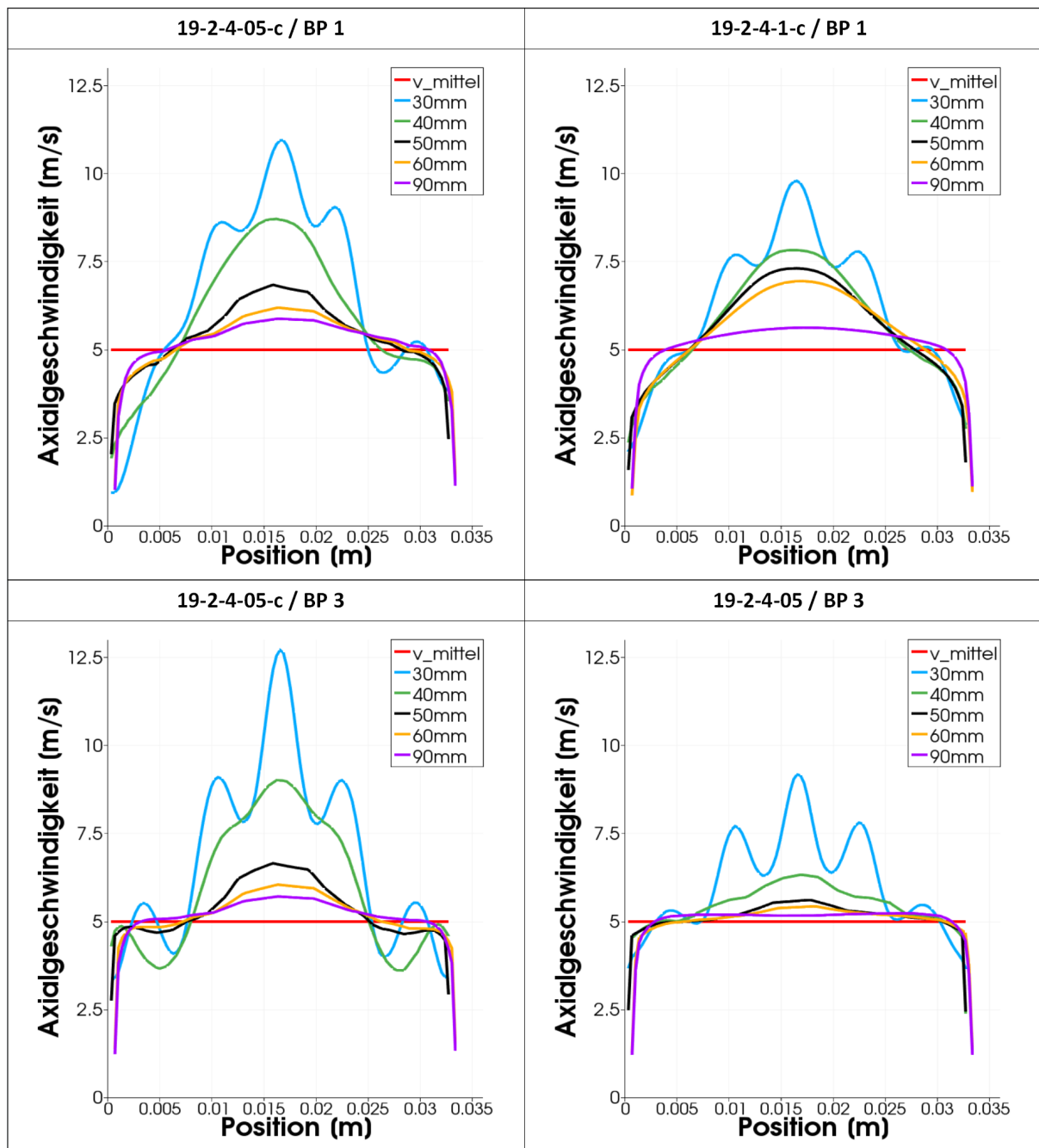


Abbildung 4.21: Axiale Geschwindigkeitsprofile bei BP 1 und 3

Die Ergebnisse für die Betriebspunkte 4 und 5, wo mittlere Geschwindigkeiten von 30 m/s bzw. 15 m/s im Mischrohr vorliegen sollen, sind in *Abb. 4.22* ausgewiesen. Die poröse Zone befindet sich bei diesen Ergebnissen 90 mm nach dem Micro-Mixer. Zwischen 40 mm und 50 mm sind hier noch deutliche Unterschiede in den Profilen zu erkennen. Bei einem Abstand von 60 mm kann hingegen kaum noch eine Änderung gegenüber dem Geschwindigkeitsprofil bei 50 mm festgestellt werden.

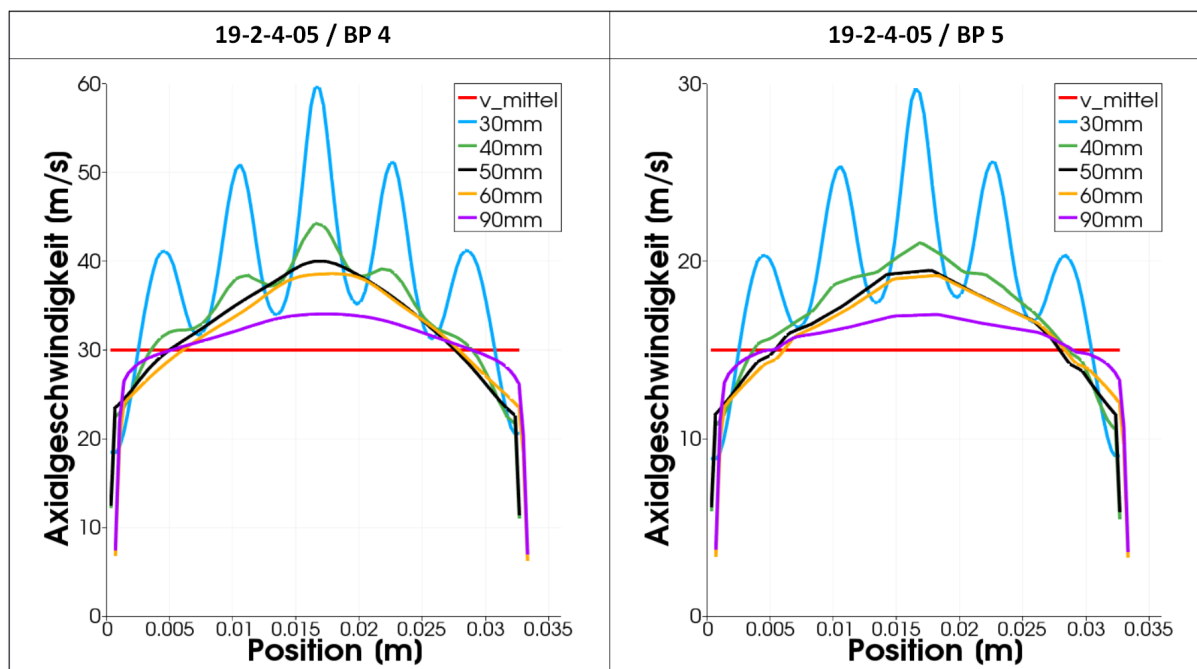


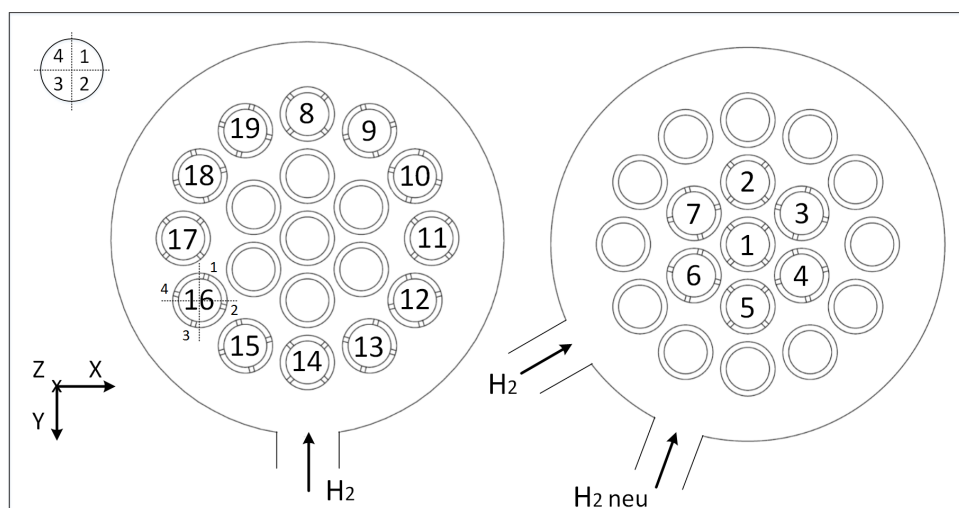
Abbildung 4.22: Axiale Geschwindigkeitsprofile bei BP 4 und 5

Zusammengefasst ist hier ein relevanter Einfluss durch die Position der porösen Zone ersichtlich. Da bei den Betriebspunkten 1 und 3, trotz der porösen Zone 50 mm nach dem Mixer, noch deutliche Geschwindigkeitsabweichungen, bezogen auf die mittlere Geschwindigkeit, erkennbar sind, sollte die Mischrohlänge hier nicht kürzer gewählt werden.

#### 4.6.5 Massenströme der Wasserstoffinjektion

Abschließend wurden noch die Wasserstoffmassenströme durch die 76 einzelnen  $H_2$ -Injektionslöcher für diverse Micro-Mixer-Konfigurationen überprüft. Um die Veränderungen bei unterschiedlichen Verbrennungsluftverhältnissen zu erörtern, werden nachfolgend die Ergebnisse der Mixervariante 19-2-4-05 bei den Betriebspunkten 1, 2 und 3 präsentiert. Weiters werden, um die Einflüsse der Düsenform sowie des veränderten Wasserstoffhauptversorgungsanschlusses identifizieren zu können, drei unterschiedliche Konfigurationen mit 1,0 mm  $H_2$ -Injektionslöchern untersucht.

Die Position der 76 Injektionslöcher wurde dabei, wie in *Abb. 4.23* dargestellt, bestimmt. Die Inneren Düsen, welche durch die erste Kammer versorgt werden, haben die Nummern 1 – 7. Bei dieser Versorgungskammer wurde, wie zu sehen ist, nachträglich noch die Position des  $H_2$ -Hauptanschlusses verändert. Der äußere Düsenring hat die Nummerierung von 8 – 19 und wird von unten mit dem Wasserstoff versorgt. Um den zweiten Index für die Bezeichnung jedes einzelnen Loches zu bekommen, muss das Fadenkreuz, welches links oben in der Abbildung zu sehen ist, über die Düsen gelegt werden. Zum besseren Verständnis ist dieses Prozedere bei Düse 16 anschaulich dargestellt. Somit ergibt sich beispielsweise für das linke untere Loch der Düse 16 die Bezeichnung 16-3.



**Abbildung 4.23:** Aufteilung der  $H_2$ -Injektionslöcher

In den folgenden Abbildungen (*Abb. 4.24* und *Abb. 4.25*) sind die prozentualen Abweichungen der Massenströme, bezogen auf den mittleren Massenstrom für die einzelnen Injektionslöcher, dargestellt.

Bei den Konfigurationen mit 0,5 mm Löchern, wo die Betriebspunkte variiert werden (*Abb. 4.24*), tauchen dabei sehr geringe Abweichungen von nicht einmal 5 % auf. Der Maximalwert ist bei Loch 17-3 und BP 3 festzustellen. Für dieses Verhalten wurde allerdings keine Erklärung gefunden. Loch 15-3 hat geometrisch gesehen exakt den gleichen Abstand zur Versorgungsleitung und auch der Strömungsverlauf dorthin ist identisch. Die Überversorgung mit Wasserstoff fällt hier jedoch bei weitem geringer aus. Vergleicht man die selben Löcher bei den verschiedenen Betriebspunkten, ist großteils eine gewisse Tendenz für die Über- bzw. Unterversorgung festzustellen.

In *Abb. 4.25* sind die Ergebnisse für die 1,0 mm  $H_2$ -Injektionslöcher bei Betriebspunkt 1 dargestellt. Die Abweichungen liegen hier teilweise bei über 20%. Bei diesen Ergebnissen können ganz klar zwei Bereiche, wo extreme Über- bzw. Unterversorgungen herrschen, identifiziert werden. Diese liegen jeweils in der näheren Umgebung des Wasserstoffhauptversorgungseinlasses. Bei den Mixern 19-2-4-1 und 19-2-4-1-c sind bei den inneren Düsen die Löcher 5-4 und 7-2 am stärksten betroffen. Relativ zum  $H_2$ -Anschluss haben diese Löcher den gleichen Abstand und Strömungsweg vorzuweisen. Zusätzlich liegen sie sehr knapp an den Löchern 6-1 und 6-2, wo auch eine Unterversorgung auftritt. Die Löcher 6-3 und 6-4 hingegen werden durch den Strömungsverlauf begünstigt und können eine Überversorgung vorweisen. Bei der Variante mit dem geänderten  $H_2$ -Anschluss ist bei Loch 5-3 die größte Überversorgung festzustellen. Hier trifft der einströmende Wasserstoff ungehindert und beinahe normal auf den Lochquerschnitt. Ein ähnliches Verhalten ist auch beim zweiten  $H_2$ -Anschluss zu sehen. Hier sind die Löcher 13-4 und 15-1 sowie die dazu am nächsten liegenden Löcher 14-1 und 14-4 am stärksten betroffen. Die Bohrungen müssen hier entgegen der Hauptströmungsrichtung des Wasserstoffs in diesem Bereich versorgt werden und weisen daher die geringeren Wasserstoffmassenströme auf.



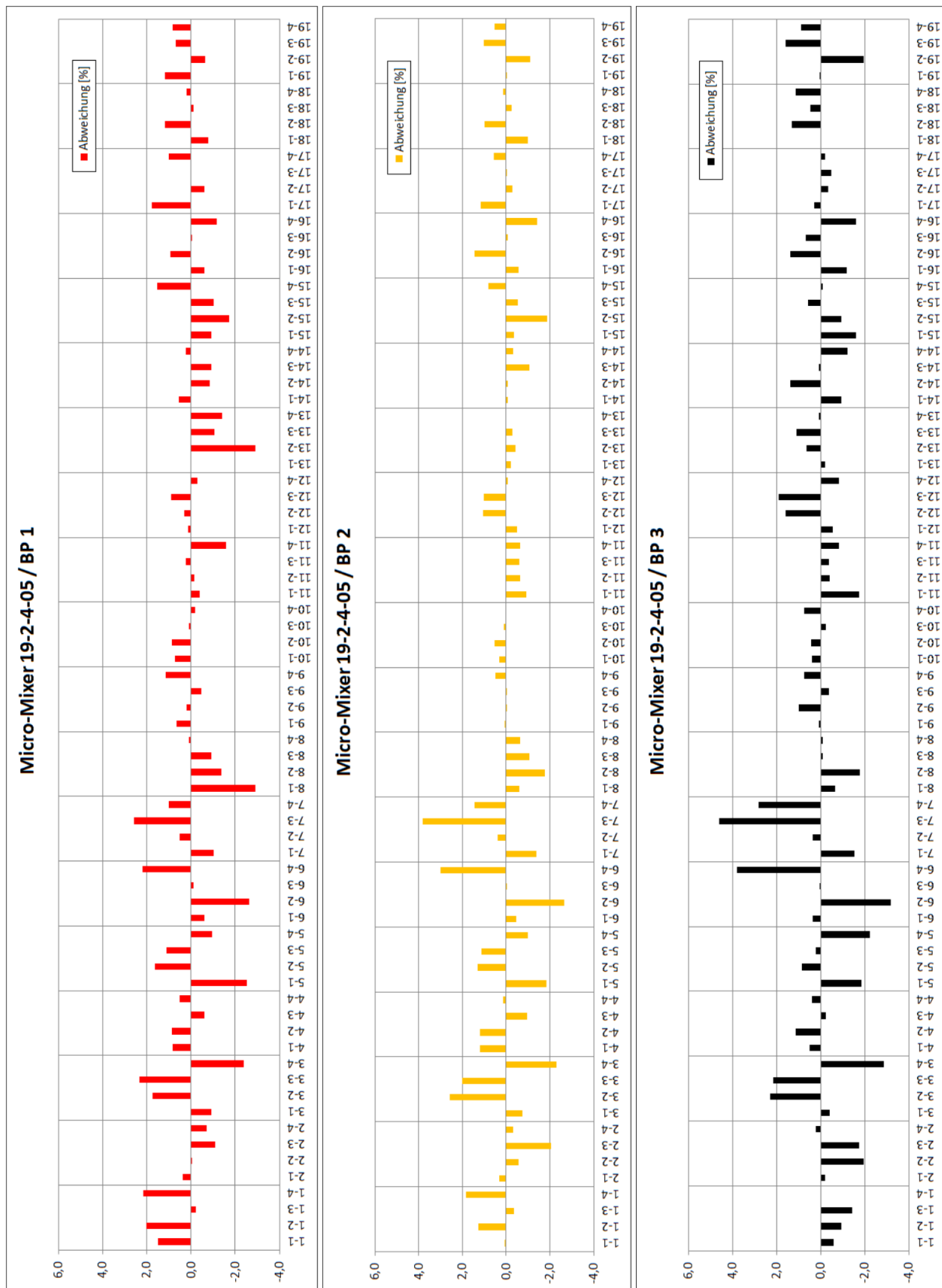


Abbildung 4.24: Abweichung der  $H_2$ -Massenströme bei BP 1-3 und einem Injektionslochdurchmesser von 0,5 mm



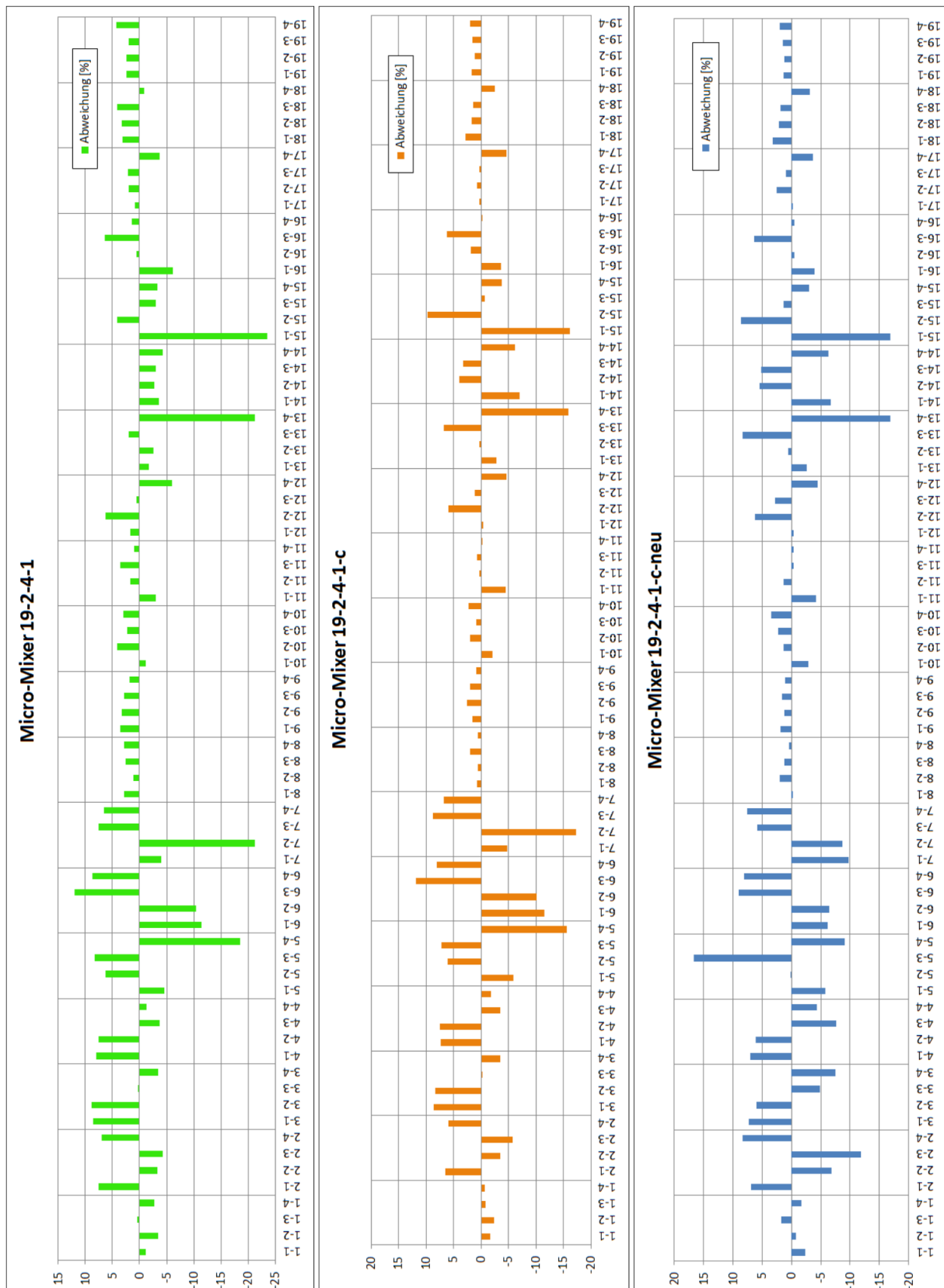
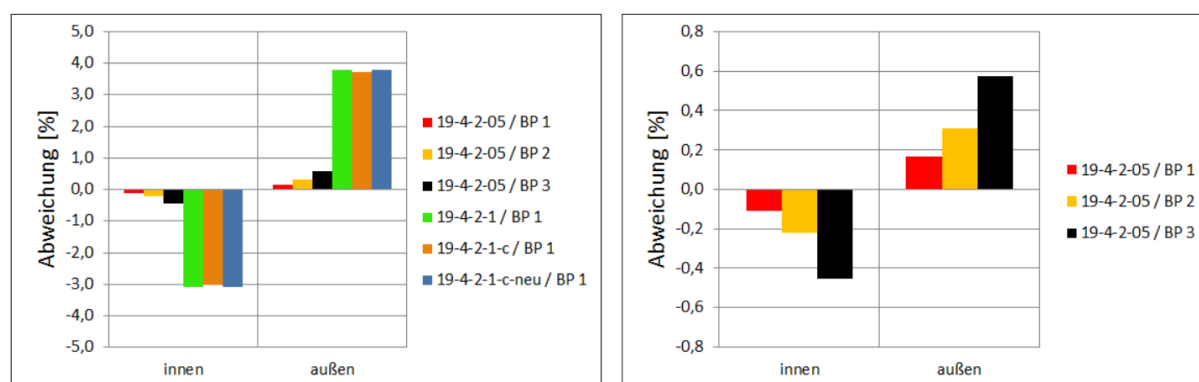


Abbildung 4.25: Abweichung der  $H_2$ -Massenströme bei BP 1 und einem Injektionslochdurchmesser von 1,0 mm

Betrachtet man nun *Abb. 4.26* können die großen Abweichungen aus den vorangegangenen Ergebnissen etwas relativiert werden. Hier werden die Abweichungen je Düse dargestellt, wodurch sich bei den 0,5 mm Konfigurationen Maximalwerte knapp über 1,5 % und bei den 1,0 mm Varianten von etwas mehr als 6,0 % ergeben. Vergleicht man die selben Düsen bei den verschiedenen Konfigurationen, ist hier wiederum eine gewisse Tendenz für die Über- bzw. Unterversorgung festzustellen. Bei den 1,0 mm Varianten sind bei allen drei Simulationen die Düsen 13, 14 und 15 unterversorgt. Diese Tatsache ist auch in den Farbplots des Verbrennungsluftverhältnisses *Abb. 4.17* zu sehen.



**Abbildung 4.26:** Abweichung der  $H_2$ -Massenströme pro Düse bei einem Injektionslochdurchmesser von 0,5 mm und 1,0 mm



**Abbildung 4.27:** Abweichung der  $H_2$ -Massenströme, Überversorgung der äußeren bzw. Unterversorgung der inneren Löcher

Bei *Abb. 4.27* sind die Abweichungen für innen- bzw. außenliegende  $H_2$ -Injektionslöcher dargestellt. Die Löcher wurden dahingehend unterteilt, wie knapp sie nebeneinander liegen. Zu den Innenliegenden zählen dabei alle Löcher der Düse 1, die inneren Löcher des mittleren Düsenrings und die inneren Löcher des äußeren Düsenrings. Die restlichen Eindüsenungen werden als außenliegend gewertet. Hier treten Abweichungen von nicht einmal 4 % bei den 1,0 mm Varianten sowie 0,6 % bei den 0,5 mm Konfigurationen auf.

Aufgrund des größeren Druckverlusts durch die 0,5 mm  $H_2$ -Injektionslöcher entstehen bei diesen Varianten geringere Inhomogenitäten bei der Wasserstoffeindüsung. Allerdings sind auch die Abweichungen der 1,0 mm Varianten in einem vertretbaren Bereich und haben bei brennstoffreichen Anwendungen durchaus ihre Berechtigung.

#### 4.6.6 Fazit

Zusammenfassend geht aus den Ergebnissen hervor, dass für die Betriebspunkte 4 und 5 lediglich die Konfiguration mit zylindrischen Düsen und 0,5 mm  $H_2$ -Injektionslöchern in Frage kommt. Hier kann eine sehr homogene Durchmischung erreicht werden und auch das axiale Strömungsprofil kann innerhalb einer kurzen Distanz relativ gut ausgeglichen werden. Bei den Betriebspunkten mit einer mittleren Geschwindigkeit von 5 m/s im Mischrohr sollten zum Schutz gegen Rückzündungen die kegeligen Düsen verwendet werden. Bei Betriebspunkt 3 wurden allerdings mit den zylindrischen Düsen bessere Resultate erzielt. Sollte sich im Verlauf der Experimente herausstellen, dass ein Rückzünden in die Mischkammer ausgeschlossen werden kann, könnte hier auch diese Konfiguration verwendet werden. Bei den Betriebspunkten 1 und 2 wurden mit 0,5 mm  $H_2$  Injektionslöchern und kegeligen Düsen die besten Resultate erzielt. Durch den erhöhten Wasserstoffmassenstrom bei diesen Betriebspunkten werden hier allerdings ein größerer Druckverlust sowie starke Turbulenzen bei der Einströmung des Wasserstoffs in die Düse generiert. Da bei diesen Betriebspunkten auch bei der Konfiguration mit 1,0 mm Löchern sehr gute Resultate erreicht werden und hier die vorher genannten Effekte nicht auftreten, sollte diese Variante auf jeden Fall mitberücksichtigt werden. Zudem kommen bei den Experimenten möglicherweise noch brennstoffreichere Gemische zum Einsatz. Hinsichtlich der Mischrohrlänge konnten durch die Uniformity Indizes ab einem Abstand von 40 mm kaum mehr Verbesserungen festgestellt werden. Betrachtet man allerdings die axialen Strömungsprofile, kann hier durch die Änderung der Länge auf 50 mm dennoch eine gleichmäßigere Verteilung der Geschwindigkeiten erreicht werden. Daher würde sich die Wahl dieser Länge hier empfehlen.

## 4.7 Gewählte Konfigurationen

Aufgrund der großen Ungleichmäßigkeit der Geschwindigkeitsprofile der Drallerzeuger war trotz der durchaus zufriedenstellenden Durchmischungsergebnisse schnell klar, dass der Micro-Mixer zur Gewährleistung des homogenen Brennstoff-Luft-Gemischs zum Einsatz kommen wird. Auf Grundlage der obig präsentierten Resultate, wurden die folgenden drei Micro-Mixer ausgewählt.

- Micro-Mixer 19-2-4-05
- Micro-Mixer 19-2-4-05-c
- Micro-Mixer 19-2-4-1-c

Ersterer soll wie in *Kap. 4.6.6* beschrieben, bei den Betriebspunkten mit mageren Verbrennungsluftverhältnissen und hohen Strömungsgeschwindigkeiten eingesetzt werden. Die weiteren zwei Varianten sind für den Einsatz unter brennstoffreichen Bedingungen sowie geringen Strömungsgeschwindigkeiten im Mischrohr bestimmt. Zudem können alle Modelle bei Vormischverbrennungsexperimenten eingesetzt werden. Da durch die Bestellung von mehreren Bauteilen der Stückpreis sinkt, werden von Micro-Mixer 19-2-4-05 und 19-2-4-05-c je zwei Stück geordert.

Für die Mischrohrlänge, welche für die nachfolgende Konstruktion des Prüfstands benötigt wird, wurde, wie ebenfalls in *Kap. 4.6.6* beschrieben, eine Länge von 50 mm gewählt.

# Kapitel 5

## Konstruktion des Prüfstandes

In diesem Kapitel wird der Gesamtaufbau des Prüfstands sowie das finale Konzept der katalytischen Brennkammer im Detail beschrieben. Neben der Neukonstruktion der Brennkammer wurde des Weiteren das Grundgerüst des Prüfstands, auf welches nachfolgend die katalytische Brennkammer aufgebaut werden soll, überarbeitet. Diese Ausarbeitungen sind ebenfalls nachfolgend beschrieben.

### 5.1 Anforderungen an den Prüfstand

Für die Konstruktion des Prüfstands bzw. der katalytischen Brennkammer wurden in einem ersten Schritt die geplanten Experimente auf zwei Umsetzungsvarianten (*Kap. 2.3.3*), wie in *Tab. 5.1* ausgewiesenen, eingegrenzt. Dabei konnte Nr. 1, die totale Umsetzung, aufgrund der hohen Betriebstemperatur bei dieser Anwendung, welche zu einer Zerstörung der Katalysatoren führen würde, ausgeschlossen werden. Durch die Anwendungen Nr. 4 und Nr. 5 würde ein zusätzlicher konstruktiver und im Verlauf der Experimente regelungstechnischer Aufwand entstehen. Hier müssten weitere Wasserstoffversorgungsleitungen für die Bereitstellung des mageren Gemischs im Sekundärstrom vorgesehen werden. Für die Parameterstudie, in der vor allem das Verhalten der Katalysatoren untersucht werden soll, sind die Varianten Nr. 2 und Nr. 3 sehr gut geeignet. Diese sollen in weiterer Folge bei verschiedenen Betriebspunkten und unterschiedlichen Drücken (Auslegungsdruck 20 bar) getestet werden.

Nr.	Variante	Katalysatorstrom	Linerstrom	Sekundärstrom	Anwendung
1	Totale Umsetzung	mager	-	-	×
2	Gestufte Umsetzung	mager	mager	-	✓
3	Gestufte Umsetzung	fett	mager	Luft	✓
4	Gestufte Umsetzung	mager	mager	mager	×
5	Gestufte Umsetzung	fett	mager	mager	×

**Tabelle 5.1:** Anwendungsvarianten für die Experimente

Weiters sind in *Tab. 5.2* die gewählten Messgrößen und die Positionen wo sie ermittelt werden sollen ausgewiesen. Die Temperaturen sollen dabei mit Thermoelementen, der Druck mit den vorhandenen Druckaufnehmern gemessen werden. Zur Analyse der Gaszusammensetzung stehen im Labor Messgeräte zur Identifizierung des Sauerstoffgehalts sowie der Stickoxide zur Verfügung. Zur Analyse des Messgases hinsichtlich des unverbrannten Restwasserstoffs kann ein Messgerät des benachbarten Instituts für Verbrennungskraftmaschinen verwendet werden.

Temperatur	Druck	Gaszusammensetzung
Primärluft	Primärluft	nach dem Katalysator
Brennstoff	Brennstoff	nach dem Liner (Abgas)
vor dem Katalysator	vor dem Katalysator	
nach dem Katalysator	nach dem Katalysator	
im Katalysator (Katalysatorbett)	Sekundärluft	
Sekundärluft	Liner	
Liner	Abgas	
Abgas		

**Tabelle 5.2:** Geplante Messgrößen für den Versuchsaufbau

Ausgehend von den obig gewählten Umsetzungsvarianten sind neben der katalytischen Brennkammer noch folgende, in *Tab. 5.3* ausgewiesene, Komponenten für eine ordnungsgemäße Strömungsführung und Regelung des Prüfstands nötig. Diese sind bereits im Verbrennungslabor vorhanden und können für die folgenden Experimente eingesetzt werden. Daher wird die katalytische Brennkammer ebenso hinsichtlich der Anschlüsse dieser Komponenten ausgelegt.

Primärluftversorgung	Lufterhitzer + Regelung
Sekundärluftversorgung	Probensonde für Abgas
Kühlluftversorgung	Thermoelementausgleichsleitungen
Wasserstoffversorgung	Druckaufnehmer
Abgasleitung	Zündbox

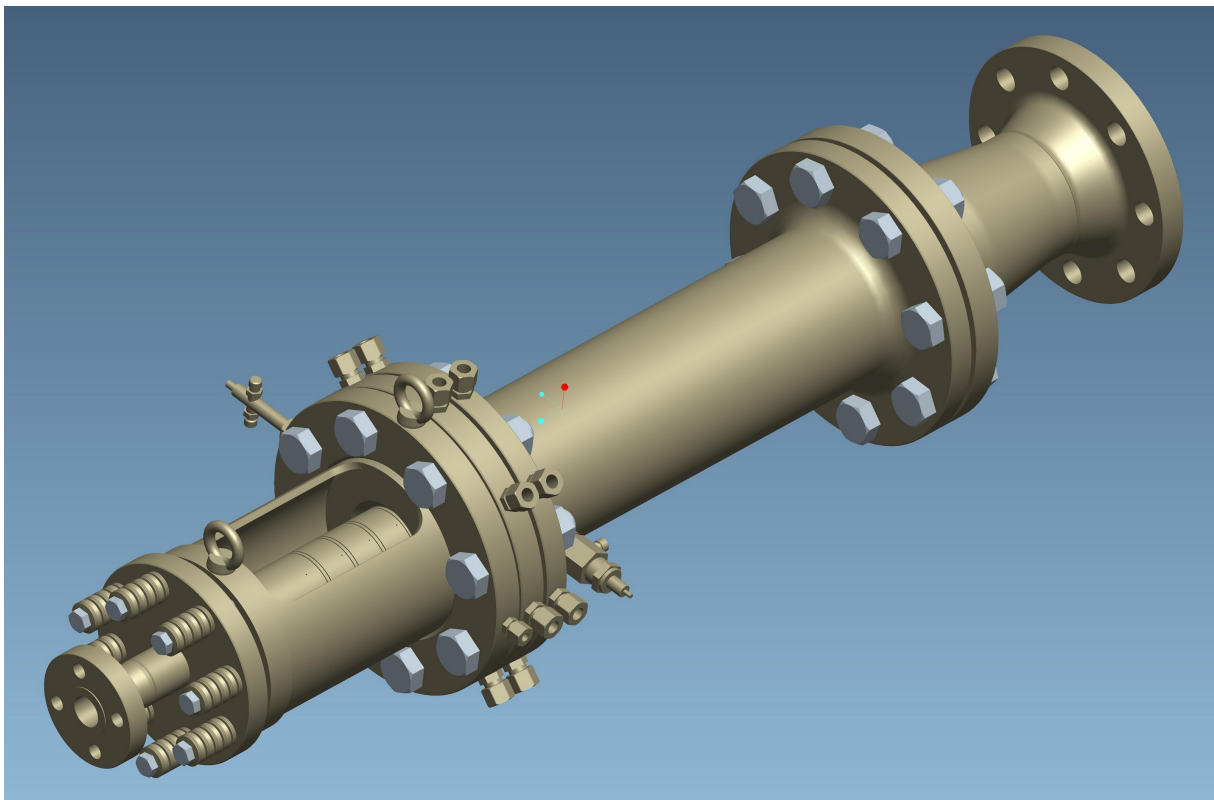
**Tabelle 5.3:** Komponenten des gesamten Prüfstandaufbaus

Die Versorgungsleitungen für Primär-, Sekundär- und Kühlluft werden über druckluftgesteuerte Ventile geregelt. Dabei soll die eingangs noch nicht erwähnte Kühlluft zur Kühlung des Liners in der zweiten Stufe der Brennkammer dienen. Die Primärluft wird vor dem Erreichen der Brennkammer noch durch einen Lufterhitzer geführt. Dadurch kann bei Bedarf die Temperatur vor dem Eintritt in die Katalysatorstrecke variiert werden. Das Abgas wird nach dem Austritt aus der Brennkammer durch ein Rohr in den für diesen Zweck vorgesehenen Abluftturm geführt. In diese Leitung ist neben Temperatur- und Druckmessstellen ebenfalls die Probensonde zur Entnahme des Messgases integriert. Der benötigte Brennstoffmassenstrom wird mittels eines Proportionalventils sichergestellt. Zur Weitergabe und Erfassung der Temperatur- und Druck-

messwerte stehen am Prüfstand Thermoelementausgleichsleitungen sowie Druckaufnehmer zur Verfügung. Sollte das Brennstoff-Luft-Gemisch nicht durch den Katalysator entzündet werden, wird für diesen Zweck an der Brennkammer eine Zündeinheit vorgesehen. Diese wird nachfolgend durch die Zündbox gesteuert.

## 5.2 Die katalytische Brennkammer

In *Abb. 5.1* ist die finale Version der katalytischen Brennkammer abgebildet. Dabei befindet sich im linken unteren Bereich die eigentliche Katalysatorstrecke, wo die einzelnen Katalysatoren in eigens dafür vorgesehene Halterungen eingesetzt werden. Im Anschluss an die drei verschraubten Flansche ist der Druckmantel, welcher die zweite Stufe der Brennkammer beinhaltet, zu sehen. Das letzte Teil zeigt den Übergang zum Abgasrohr. Für den Bereich der Katalysatorstrecke wurden anfänglich noch ein weiteres Konzept erarbeitet, welches sich allerdings, wie bei Simulationen festgestellt wurde, als untauglich herausstellte.



**Abbildung 5.1:** Katalytische Brennkammer

Im nächsten Kapitel wird die Funktionsweise der einzelnen Komponenten der Brennkammer noch näher erläutert.

### 5.2.1 Funktionsweise und Aufbau

In *Abb. 5.2* ist ein horizontaler Schnitt durch den Aufbau dargestellt. Die Primärluft strömt dabei durch den Vorspannflansch in die Brennkammer ein und trifft dort als Erstes auf den Micro-Mixer. Dieser wird von unten (hier nicht zu sehen) mit Wasserstoff versorgt und gewährleistet die Zusammenführung der beiden Massenströme. Nachfolgend soll im Mischrohr die homogene Durchmischung des Brennstoffs und der Luft sowie der Ausgleich des axialen Strömungsprofils (siehe *Kap. 4*) stattfinden, ehe das Gemisch in den ersten Katalysator eintritt. Wie in der Abbildung zu sehen ist, besteht die Katalysatorstrecke aus mehreren Teilen. In die einzelnen Katalysatorhalterungen kann jeweils ein Katalysator mit einer Länge von 30 mm (siehe *Kap. 3.4*) eingesetzt werden, wodurch sich eine maximale Gesamtlänge von 120 mm (vier Katalysatoren) ergibt. Der letzte Katalysator befindet sich dabei bereits in dem nachfolgenden Flansch der Halterung. Durch die gewählte Konstruktion kann die Katalysatorstrecke in der Länge variiert werden ohne den Abstand zwischen dem Micro-Mixer und dem ersten Katalysator zu beeinflussen. Dafür müssen lediglich die nicht benötigten Katalysatorhalterungen, durch eine Wendung um 180°, vor dem Micro-Mixer positioniert werden. Zwischen den einzelnen Stücken (Micro-Mixer, Mischrohr, Katalysatorhalterung) befinden sich spezielle Hochtemperaturdichtringe, wodurch Experimente bei höheren Drücken und Temperaturen bis zu 1000 °C problemlos durchgeführt werden können. Verspannt wird die gesamte Katalysatorstrecke durch den Vorspannflansch, welcher mit acht M 12 Schrauben an dem nachfolgenden Ring der Halterung befestigt ist. Um die Längenänderung der Katalysatorstrecke aufgrund der Temperaturänderungen im Laufe der Experimente zu kompensieren, und trotzdem eine annähernd konstante Flächenpressung zu erhalten, werden bei der Fixierung des Vorspannflansches zusätzlich Federpakete verwendet. Nach dem Austritt aus dem Katalysator trifft die Strömung auf die Probensonde und tritt in weiterer Folge durch die Düse in den Liner ein. Für den Fall eines fetten Gemischstroms durch die Katalysatorstrecke, wird an dieser Stelle ebenfalls die Sekundärluft eingebracht um eine vollkommene Verbrennung des Wasserstoffs unter mageren Bedingungen zu gewährleisten. Des Weiteren ist im Liner die Zuführung der Zündeinheit vorgesehen. Im Falle, dass das Gemisch nicht durch den Katalysator entzündet wird, kann dadurch die Verbrennung des Wasserstoffs sichergestellt werden. Mit Hilfe der Kühlluft, welche durch die Bohrungen im Druckmantelflansch eingebracht wird, kann zum einen der Liner gekühlt sowie nachfolgend die Abgastemperatur gesenkt werden.

Nachfolgend werden die wichtigsten Komponenten im Detail beschrieben. Eine detaillierte Materialliste sowie die zugehörigen Fertigungszeichnungen sind der beiliegenden CD zu entnehmen.



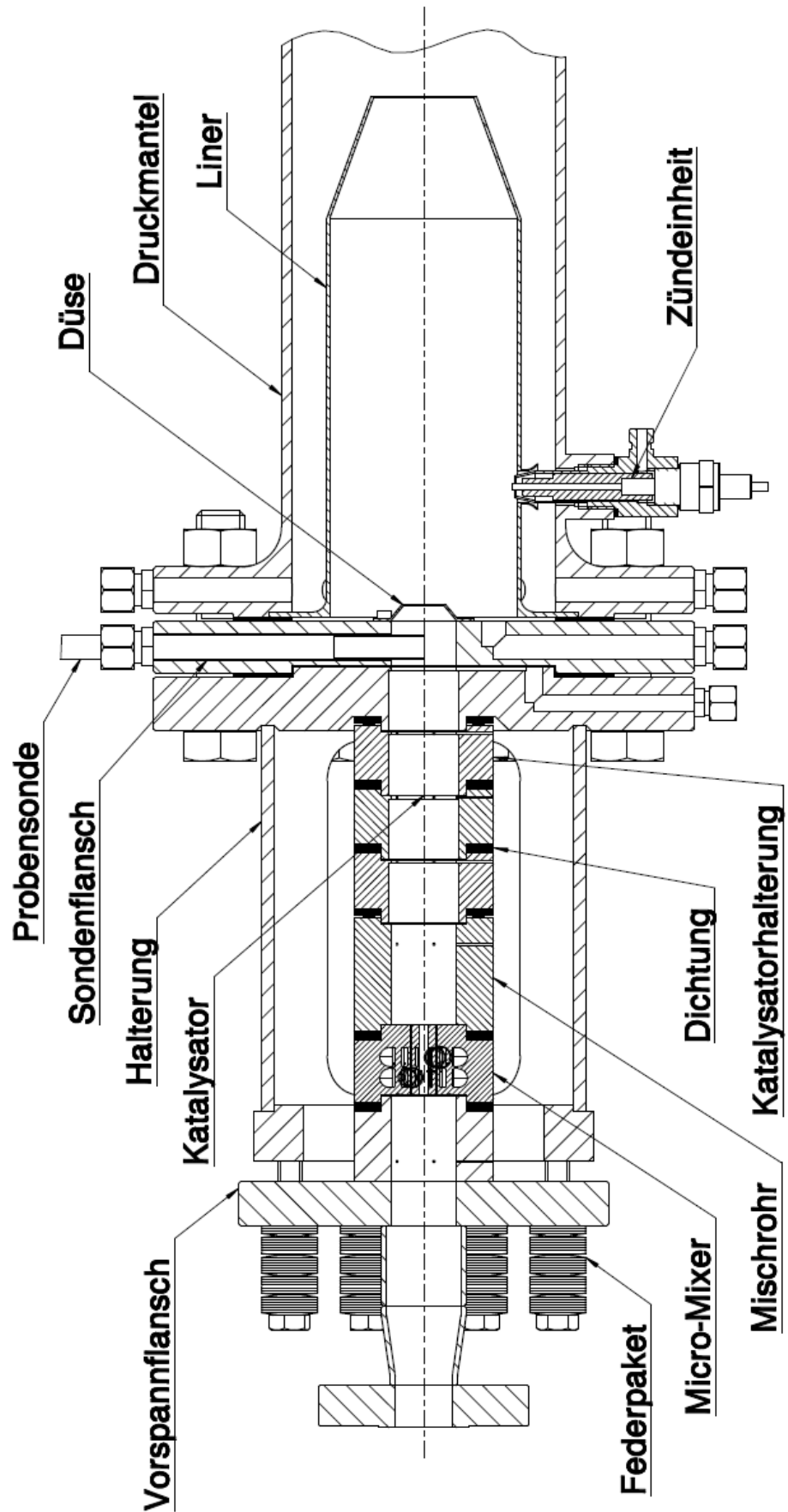
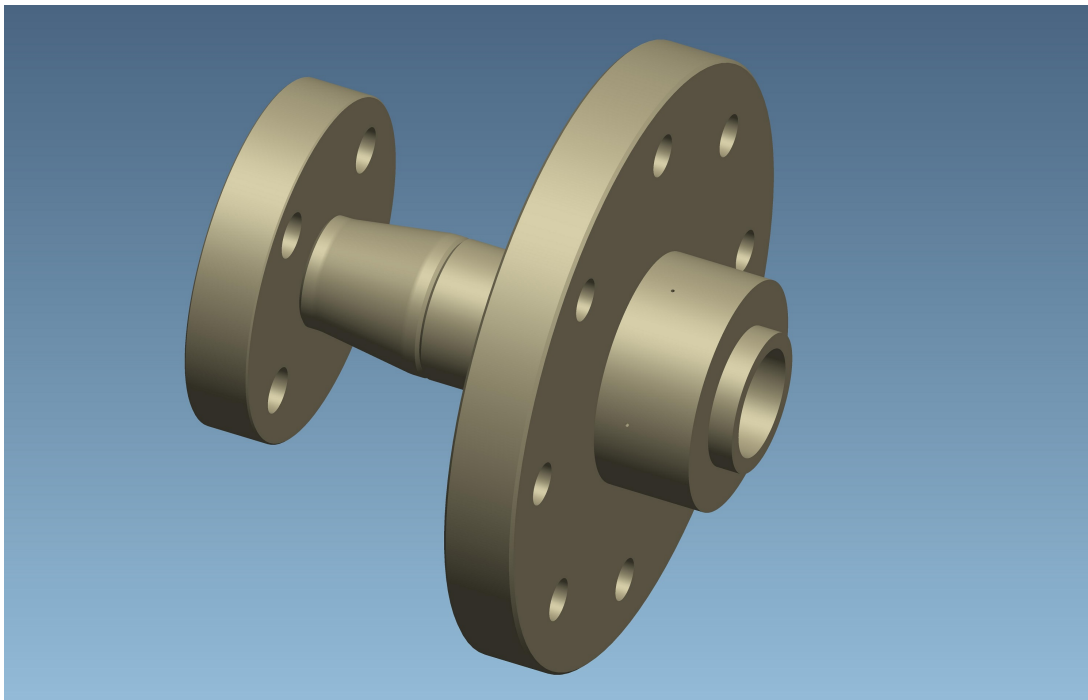


Abbildung 5.2: Schnittdarstellung der katalytischen Brennkammer

### 5.2.1.1 Vorspannflansch

Bei dem Vorspannflansch handelt es sich um eine Schweißkonstruktion, bestehend aus fünf Einzelteilen. Im linken Bereich der *Abb. 5.3* ist der Anschlussflansch für den Lufterhitzer ersichtlich. Bei diesem Normflansch (DN 15 / PN 100) muss allerdings noch der Innendurchmesser aufgehohlet werden, damit sich der gleiche Durchmesser wie beim Lufterhitzer ergibt. Nachfolgend sind eine Reduktion sowie ein kurzes Rohrstück zu sehen. Dadurch wird der Anströmdurchmesser auf die benötigten 33 mm vergrößert. Bei dem größeren Flansch handelt es sich um eine Sonderanfertigung. Die Hauptabmessungen entsprechen dabei einem Blindflansch DN 65 / PN 40. Allerdings sind für die Schraubenlöcher nur Bohrungen mit einem Durchmesser von 13 mm vorzusehen. Zusätzlich wird der Blindflansch in der Mitte mit einem  $\text{Ø}33$  mm Bohrloch versehen und anschließend wird das Anschlussstück für die Katalysatorstrecke angeschweißt. An der Oberfläche des Anschlussstücks sind kleine Bohrlöcher, durch welche anschließend Druck- und Temperaturmessungen der einströmenden Primärluft vorgenommen werden können, zu sehen. Details zur Form dieses Teils werden in *Kap. 5.2.1.3* erläutert.

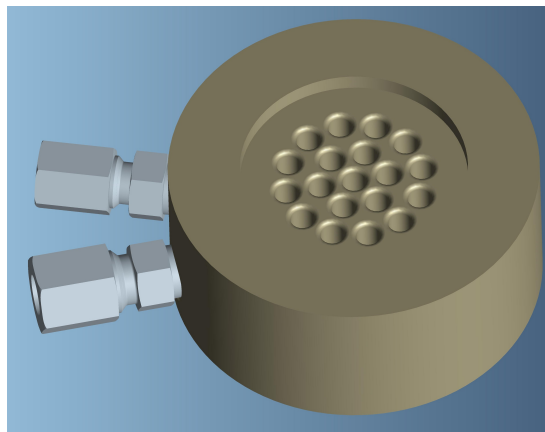


**Abbildung 5.3:** Vorspannflansch

### 5.2.1.2 Micro-Mixer

Das Innere des Micro-Mixers wurde bereits in *Kap. 4.2.1* sehr genau erläutert. Daher wird hier lediglich die äußere Form sowie die Versorgung des Mixers mit Wasserstoff beschrieben. Der Außendurchmesser wurde dabei entsprechend der Abmessungen des Mischrohres bzw. der Katalysatorhalterungen angepasst. Die beiden Anschlussbohrungen sind um  $20^\circ$  zueinander verdreht um eine komfortable Montage der Anschlussverschraubungen zu gewährleisten. Da bei dem 3-D Druckverfahren keine Gewinde gestaltet werden können, müssen für die Verschraubungen jeweils  $1/8''$ -Gewinde eingearbeitet werden. Die Serto-Anschlussverschraubungen, zur Versorgung mit

Wasserstoff, besitzen dazupassende NPT-Gewinde und sind dadurch metallisch dichtend. Hier ist die richtige Wahl der Verschraubung zu beachten. Für den Anschluss, der näher am Düsen-eintritt (abgerundete Düsen) liegt, ist eine 6 mm sowie für den zweiten eine 8 mm Verschraubung vorgesehen. Dadurch sollen, wie in *Kap. 4.2.1* erklärt, die unterschiedlichen Massenströme für die zwei Versorgungskammern im Micro-Mixer geregelt werden.



**Abbildung 5.4:** Micro-Mixer mit Anschlüssen

An die beiden Verschraubungen wird in weiterer Folge ein 6 mm bzw. 8 mm Rohr angeschlossen und durch die Öffnung der Halterung (siehe *Kap. 5.2.1.5*) nach außen geführt. Dort werden die beiden Leitungen über ein T-Stück zusammengeführt. Durch den dritten Abgang des T-Stücks werden die Rohre an die Wasserstoffversorgungsleitung angeschlossen. Zur einfachen Handhabung dieser Verbindung, ist hier eine für Wasserstoff geeignete Schnellkupplung der Firma Walther Präzision vorgesehen.

### 5.2.1.3 Katalysatorhalterung, Mischrohr

In *Abb. 5.5* sind zwei Ansichten für die Katalysatorhalterungen, welche einen Außendurchmesser von 70 mm haben, dargestellt. Der Innendurchmesser ist entsprechend der Abmessungen der Katalysatoren (siehe *Kap. 3.4*) ausgelegt. Des Weiteren ist jede Katalysatorhalterung mit je fünf 1,0 mm Bohrungen, welche gleichmäßig über den Umfang verteilt sind, versehen. Durch diese Bohrungen können, zur Bestimmung des Drucks (1x) und der Temperatur (4x), Druckmessröhrchen sowie Thermoelemente in das Innere des Bauteils geführt werden. Die Messkomponenten werden außen mit der Halterung verlötet um die Dichtigkeit des Systems zu gewährleisten. Da in diesem Bereich Temperaturen bis zu 900 °C herrschen können, muss dazu ein spezielles Hochtemperaturlot verwendet werden. Aus Gründen der Festigkeit wurden die Löcher mit einem gewissen Abstand zur Bauteilkante positioniert. Betrachtet man das rechte Bild, ist im Inneren der Halterung eine kleine Stufe ersichtlich. Dadurch kann ein Durchrutschen des Katalysators, wenn er von links in die Katalysatorhalterung eingeschoben wird verhindert werden. An der 1,5 mm breiten Stufe sind des Weiteren die eintretenden Durchführungsbohrungen ersichtlich. Befindet sich der Katalysator in der Halterung, schließt er exakt mit der vorderen Fläche des Ansatzes ab. Werden in weiterer Folge mehrere Halterungen aneinander gereiht, ist zwischen diesen, bei gepresster Dichtung, noch ein Spalt von 0,5 mm vorgesehen. Gesamt ergibt das einen Abstand von

2,0 mm zwischen den einzelnen Katalysatoren. Durch diesen Abstand entstehen natürlich unerwünschte Beeinflussungen der Strömung. Allerdings überwiegen hier die Vorteile, da durch diese Konstruktion die Katalysatorlänge variiert sowie durch die Einbringung der Thermoelemente der axiale Temperaturverlauf bestimmt werden kann. Um den geringen Abstand zwischen den Katalysatoren zu ermöglichen, ist die Katalysatorhalterung an einem Ende mit einem Ansatz sowie am anderen mit einer Ausdrehung ausgeführt. Weiters werden dadurch die einzelnen Bauteile sowie die Dichtungen beim Zusammenbau zentriert. Bei der Variation der Länge, werden nicht benötigte Katalysatorhalterungen zwischen dem Anschlussstück des Vorspannflansches und dem Micro-Mixer eingebaut. Daher sind auch bei diesen Bauteilen die gestuften Enden vorzusehen.

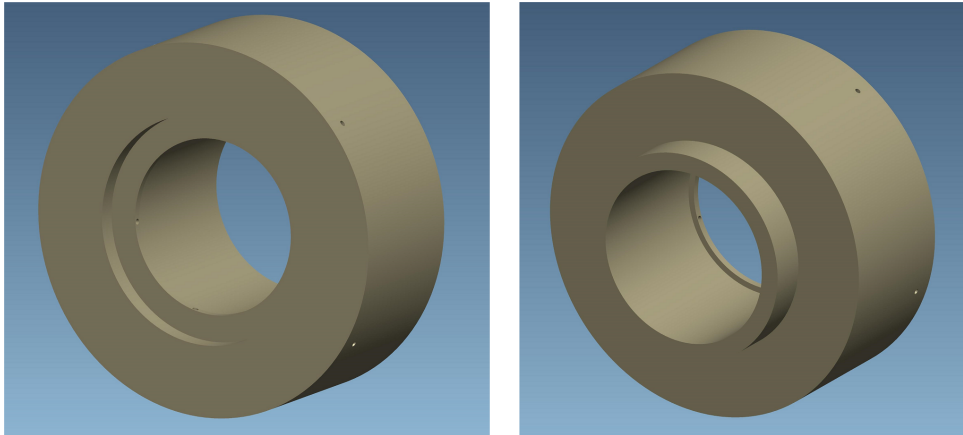


Abbildung 5.5: Katalysatorhalterung

Das Mischrohr ist der Katalysatorhalterung sehr ähnlich und es sind auch hier Bohrungen für Temperatur- und Druckmessstellen vorgesehen. Allerdings sind bei diesem Bauteil zwei Ausdrehungen, wie in *Abb. 5.2* zu sehen, an den Enden nötig.

#### 5.2.1.4 Dichtung

Aufgrund der hohen Belastungen durch Druck (bis 20 bar) sowie Temperatur (bis 900 °C) konnte nur eine geeignete Dichtung für diese Anwendung gefunden werden. Es handelt sich dabei um eine Spiraldichtung der Firma Garlock (siehe *Anhang A*). In *Tab. 5.4* sind einige Eigenschaften der Spiraldichtung zusammengefasst. Die Dichtung wird innen und außen durch einen Metallring gestützt. Die Dichtfläche selbst besteht aus einem aufgerollten Metallband, welches in den Zwischenräumen mit dem speziell für Hochtemperaturanwendungen geeigneten Werkstoff Therma-Pur ausgekleidet ist. Zur Gewährleistung der Dichtheit wird in weiterer Folge mit der benötigten Flächenpressung von  $55 \text{ N/mm}^2$  gerechnet. Mit den gewählten Abmessungen ergibt sich daher eine Gesamtvorspannkraft von ca. 57 kN. Diese Kraft ist ein wichtiger Parameter für die Auslegung der Halterung (*Kap. 5.2.1.5*) sowie der Federpakete (*Kap. 5.2.1.6*). Bei dieser konstanten Flächenpressung ergibt sich weiters eine Dicke der Dichtung von 4,5 mm und somit kann der Spalt von 0,5 mm zwischen den einzelnen Bauteilen, wodurch eine Doppelpassung ausgeschlossen werden kann, aufrecht gehalten werden. Für die jeweiligen metallischen Dichtflächen wird eine Rautiefe von  $R_a = 6,4 \mu\text{m}$  empfohlen.

<b>Spiraldichtung</b>	
<b>Typ</b>	CRI
<b>Abmessungen</b>	Ø 43 x 49 x 61 x 70 x 4,8 mm
<b>Füllstoff</b>	Therma Pur
<b>maximale Temperatur</b>	1000°C
<b>Druck</b>	> 20 bar
<b>benötigte Flächenpressung</b>	55 N/mm <sup>2</sup>
<b>Dichtfläche</b>	1036,7 mm <sup>2</sup>
<b>Vorspannkraft</b>	57019 N

Tabelle 5.4: Eigenschaften der Spiraldichtung

### 5.2.1.5 Halterung

In *Abb. 5.6* ist die Halterung, in der die Katalysatorstrecke aufgebaut wird dargestellt. Die drei Hauptteile, der Flansch, das Rohr und der Ring, sind als Schweißkonstruktion ausgeführt.

Der Flansch entspricht den Hauptabmessungen nach einem genormten DN 125 / PN 40 Blindflansch. Da in diesen Flansch allerdings der erste Katalysator eingesetzt wird, muss er dicker gefertigt werden. Zusätzlich ist seitlich am Flansch eine Verschraubung, welche ebenfalls angeschweißt wird, positioniert. Durch diese sowie durch eine nachfolgende Nut im Flansch können, wie in *Abb. 5.2* zu sehen, Thermoelemente und Druckmessröhrchen zum Katalysator geführt werden. Die Messleitungen werden dazu, zur Abdichtung, in ein 8 mm Rohr eingelötet und an der Verschraubung fixiert.

Das Rohr, welches zur Übertragung der Vorspannkraft dient, ist in vertikaler Richtung mit zwei großen Ausnehmungen versehen. Durch diese werden die Wasserstoffversorgungsleitungen sowie die gesamten Messleitungen aus der Katalysatorbaugruppe geführt. Des Weiteren wird die Katalysatorstrecke durch freie Konvektion gekühlt. Da das Rohr seitlich geschlossen ist, sind bei einem eventuelle Versagen einer Dichtung, die umliegenden Bereiche des Labors geschützt.

Abschließend folgt der Ring, welcher mit acht M 12 Gewindelöchern versehen ist. An dieser Stelle wird die Zugkraft zur Erreichung der benötigten Vorspannkraft für die Dichtungen in die Halterung eingeleitet. Zusätzlich können in den Ring und in den Flansch Ringschrauben eingeschraubt werden, um die gesamte Katalysatorbaugruppe mit einem Kran transportieren zu können.

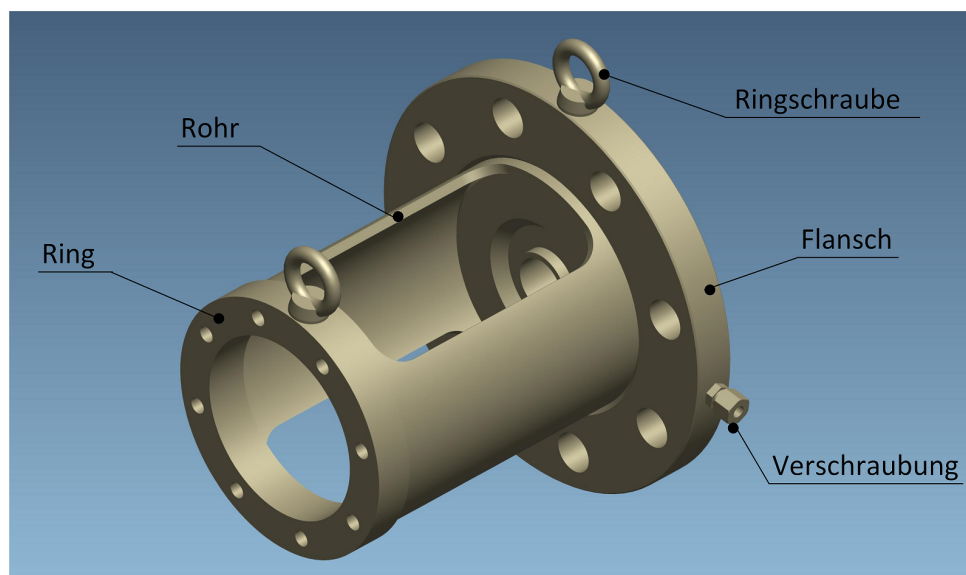


Abbildung 5.6: Halterung

Der schwächste Querschnitt und somit die größte Gefahr, dass die Konstruktion den Belastungen nicht standhält, befindet sich in der Mitte des Rohres. Durch die Ausnehmungen wird der Rohrquerschnitt an dieser Stelle stark reduziert. In *Tab. 5.5* sind nun die Sicherheiten gegen eine plastische Verformung für den gewählten Edelstahl bei der ermittelten Zugbeanspruchung für verschiedene Temperaturen ausgewiesen. Da die Erhöhung der Zugkraft infolge der thermische Ausdehnung der Katalysatorstrecke nicht komplett von den Federpaketen (*Kap. 5.2.1.6*) kompensiert werden kann, sind in der Tabelle zusätzlich die Werte für eine höhere Belastung angeführt. Das Rohr besitzt dabei eine Wandstärke von 6 mm. Wie zu sehen ist, können hier sehr gute Werte erreicht werden und das Bauteil kann den Belastungen auch bei höheren Temperaturen problemlos standhalten. Um das Spannungsverhalten in der gesamten Katalysatorbaugruppe zu erfassen, sollte hier eventuell noch eine FE-Simulation durchgeführt werden.

Edelstahl 1.4571			
Zugkraft	Temperatur	$R_{p0.2}$ [27]	Sicherheit
57,02 kN → 27,2 N/mm <sup>2</sup>	204°C	179 N/mm <sup>2</sup>	6,57
	427°C	146 N/mm <sup>2</sup>	5,36
	537°C	145 N/mm <sup>2</sup>	5,33
	649°C	145 N/mm <sup>2</sup>	5,33
	871°C	112 N/mm <sup>2</sup>	4,11
81,0 kN → 34,4 N/mm <sup>2</sup>	204°C	179 N/mm <sup>2</sup>	5,21
	427°C	146 N/mm <sup>2</sup>	4,25
	537°C	145 N/mm <sup>2</sup>	4,22
	649°C	145 N/mm <sup>2</sup>	4,22
	871°C	112 N/mm <sup>2</sup>	3,26

Tabelle 5.5: Sicherheit gegen plastische Verformung

## 5.2.1.6 Federpaket

Um die Längenausdehnung der Katalysatorstrecke durch die Erwärmung während der Versuchsfahrten zu kompensieren und um die Flächenpressung der Dichtung annähernd konstant zu halten werden bei der Konstruktion Tellerfederpakete eingesetzt. Während des Betriebs können am Ende der Katalysatorstrecke bis zu 900 °C sowie am Eintritt ca. 200 °C herrschen. Die Katalysatorstrecke misst eine Gesamtlänge von ca. 200 mm. Geht man nun von einer mittleren Temperaturerhöhung der gesamten Katalysatorstrecke von rund 550 °C aus ergibt sich nach Gl. (5.1) bei einem Wärmeausdehnungskoeffizienten von  $\alpha = 20 \cdot 10^{-6} \text{ 1/K}$  [27] eine Längenänderung von 2,2 mm. Diese muss nun durch die Tellerfedern ausgeglichen werden.

$$\Delta l = l_0 \alpha \Delta T \quad (5.1)$$

Nimmt man weiters die errechnete Vorspannkraft von 57,02 kN und teilt sie auf die acht Schrauben auf, ergibt sich eine jeweilige Kraft von 7,13 kN. Mit diesen beiden Parametern wurde in weiterer Folge unter der Verwendung eines Auslegungsprogramms der Fa. Mubea eine geeignete Tellerfederkonfiguration ausgewählt.

In Abb. 5.7 sind nun die Abmessungen sowie die Federkennlinie der Tellerfederpakete ausgewiesen. In dem Diagramm sind die Belastungspunkte bei 7,0 kN und 9,0 kN dargestellt. Der Punkt dazwischen, zeigt die resultierende Federkraft bei der Pressung des Pakets um 2,2 mm bezogen auf den ersten Punkt. Dieser liegt noch knapp unter der Belastung von 9,0 kN. Durch die erhöhte Federkraft wird ebenso die Vorspannkraft für die Dichtung gesteigert. Es ergibt sich hier nun eine Flächenpressung von ca. 70 N/mm<sup>2</sup>, wodurch auch diese leicht gestaucht wird und einen Teil der Längenänderung aufnimmt. Für die Halterung ergibt sich eine Gesamtzugkraft von ca. 81,0 kN, wobei dennoch keine Gefahr einer plastischen Verformung des Rohres besteht (siehe Tab. 5.5).

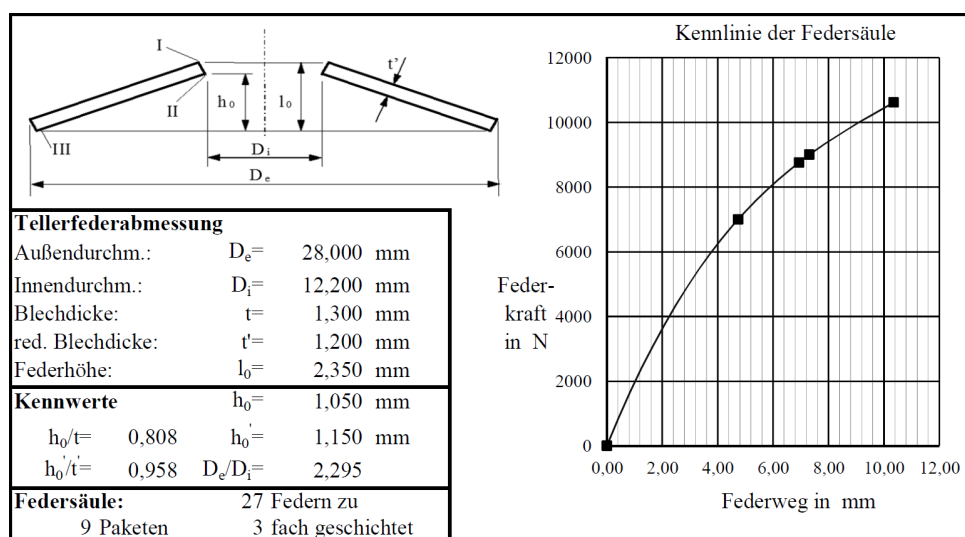


Abbildung 5.7: Abmessung und Kennlinie der Federpakete

### Montage und Sicherung der Schrauben

Bei der Montage müssen die Federpakete, damit die entsprechenden Vorspannkraft aufgebracht werden kann, um je 5 mm zusammengedrückt werden. Das entspricht, bei einer ISO-Norm M 12 Schraube mit einer Steigung von 1,75 mm,  $2\frac{3}{4}$  Umdrehungen. Die Schrauben sollten bei der Montage in mehreren Schritten jeweils gegenüberliegend nachgezogen werden um dadurch eine gleichmäßige Verteilung der Kräfte zu erreichen. Zusätzlich müssen die Schrauben nach der Befestigung gegen ein unkontrolliertes Lösen gesichert werden. Dazu sind die Schraubenköpfe im Vorfeld mit Bohrlöchern zu versehen. Nachfolgend wird ein dünner Draht durch alle Löcher der Schrauben geführt und die Enden verbunden.

#### 5.2.1.7 Sondenflansch

Das Grundmaterial für den Sondenflansch ist ein Blindflansch DN 125 / PN 40. In weiterer Folge wird der Flansch mit einem Durchgangsloch ( $\text{Ø}33$  mm) in der Mitte, dem Loch für die Probensonde ( $\text{Ø}13$  mm) und den Kühlluftbohrungen ( $\text{Ø}10$  mm) versehen. Bei den Kühlluftleitungen ist dabei ein Reserveanschluss vorgesehen. Zur Montage der Gasprobensonde sowie der Kühlluftleitungen, werden außen am Flansch Verschraubungen angeschweißt. Zusätzlich wird, um den Abstand zwischen dem letzten Katalysator und der Probensonde so gering wie möglich zu halten, an der Vorderseite des Flansches eine Vertiefung vorgesehen. Der Sondenflansch wird bei der Montage zwischen der Halterung und dem Druckmantel eingeklemmt. Damit er bei einer Demontage der Katalysatorbaugruppe dennoch mit dem Druckmantel verbunden ist, wird er mit zwei M 8 Zylinderkopfschrauben durch die im äußeren Bereich des Flansches befindlichen Durchgangsbohrungen an diesen befestigt. Die Schraubenköpfe werden dabei gänzlich im Flansch versenkt.

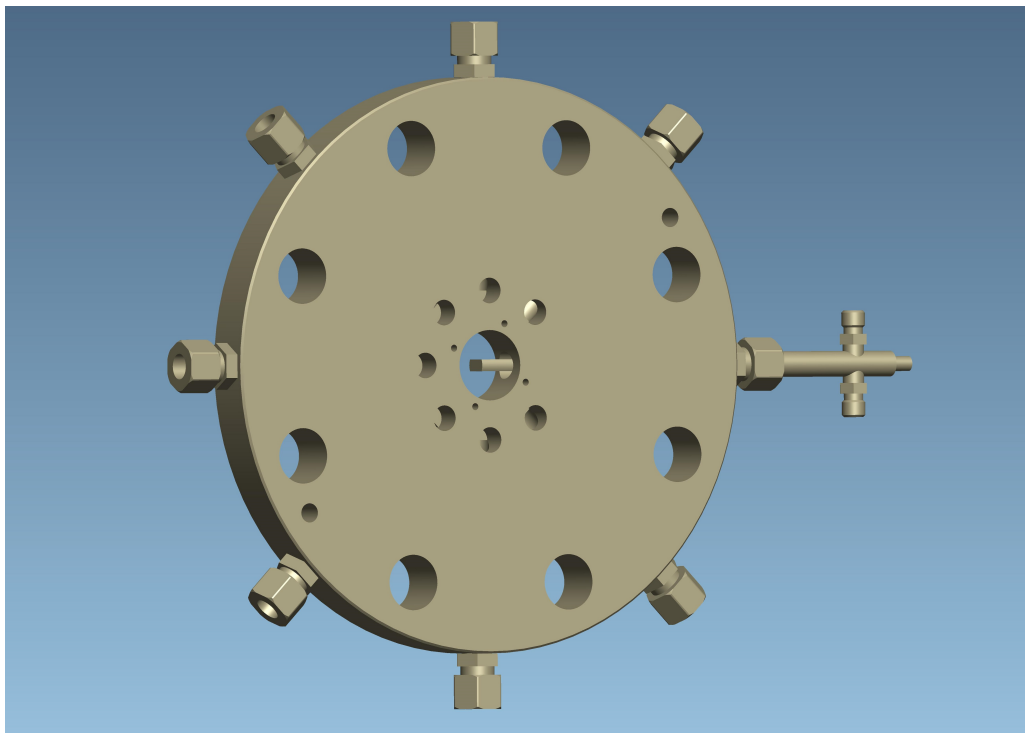


Abbildung 5.8: Sondenflansch



Die Probensonde, welche ebenfalls auf dem Bild zu sehen ist, wird nachfolgend an die im Labor vorhandene Messgasleitung sowie an einen Kühlkreislauf, um einer Überhitzung der Sonde entgegenzuwirken, angeschlossen.

Zur Montage der Düse, welche bei Experimenten unter fetten Bedingungen eingesetzt wird, sind um das mittlere Durchgangsloch noch vier M4 Gewindebohrungen angebracht. Durch die Düse soll zum einen eine Beschleunigung der Einstromung in den Liner und zum andern an der Kante der Düse eine Stabilisierung der Flamme erreicht werden.

#### 5.2.1.8 Druckmantel

Als Druckmantel für die zweite Stufe der Brennkammer soll ein Rohr DN 125, welches schon bei vorangegangenen Experimenten eingesetzt wurde, verwendet werden. Dabei ist die Nut an der Dichtfläche des linken Flansches, welche als Einsatz für den Liner dient, bereits vorhanden. In weiterer Folge müssen noch die Kühlluftbohrungen gefertigt sowie die Verschraubungen zum Anschluss der Kühlluftleitungen angeschweißt werden. Eine Einschraubung soll, wie bereits bei der Halterung erklärt, zur Durchführung von Thermoelementen und Druckmessröhrchen dienen. Diese Messleitungen sollen nachfolgend am Liner appliziert werden. Zusätzlich ist, zur Einschraubung der Zündeinheit, ein Rohrnippel mit einem M 22 Gewinde vorzusehen.

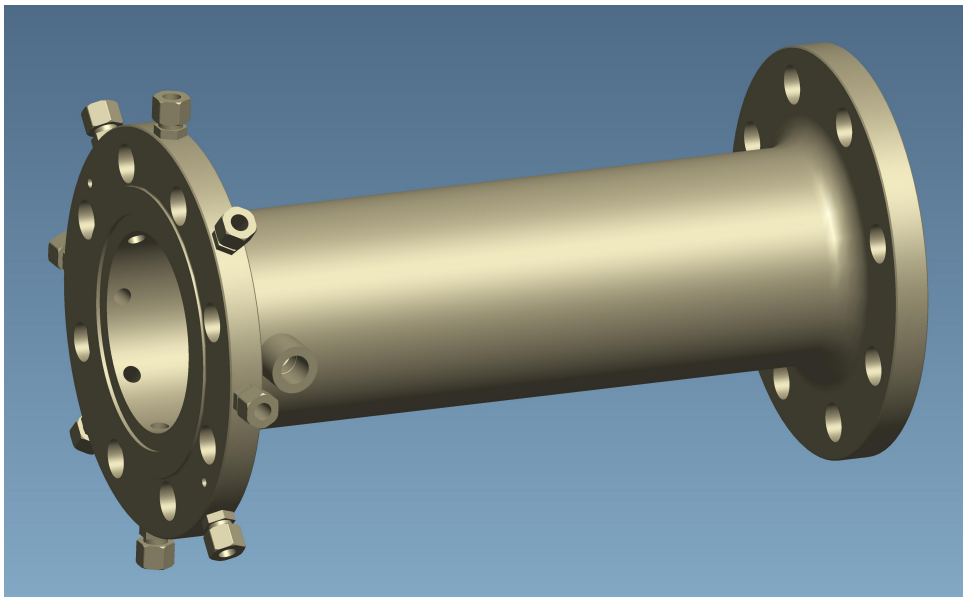


Abbildung 5.9: Druckmantel

#### 5.2.1.9 Liner

Der Liner ist sehr einfach aufgebaut (siehe *Abb. 5.2*). Er besteht aus einem Ring an dem weiters ein Rohr und eine Düse angeschweißt werden. Die Düse soll zur Beschleunigung der Strömung dienen und somit eine Rezirkulation der Kühlluft von außen in den Liner verhindern. Am Umfang des Rohrs ist zudem noch eine Öffnung, wodurch die Zündeinheit in den Liner geführt werden kann, vorzusehen. Die Durchführung muss entweder als Langloch oder axial verschieb-

bar ausgeführt werden, da sich im Verlauf der Experimente aufgrund der hohen Temperaturen der Liner ausdehnen wird.

#### 5.2.1.10 Zündeinrichtung

Die Zündeinheit besteht aus mehreren Teilen und wird in den Druckmantel eingeschraubt. Sie soll zur Sicherstellung der Zündung des Brennstoff-Luft-Gemischs, falls dieses nicht durch den Katalysator entzündet wird, dienen. Die Hauptbestandteile der Einheit sind die Zündkerze, ein Isolator und die Einschraubung. Zwischen Zündkerze und Einschraubung wird zur Dichtung zusätzlich ein Kupferring verwendet. Der zusammengesetzte Zustand der Zündeinrichtung ist in *Abb. 5.2* zu sehen. Bei der Zündkerze sowie dem Isolator handelt es sich um Normteile, welche mit einem speziellen Keramikleber miteinander verbunden werden. Der Isolator ist nötig um ein vorzeitiges überspringen des Zündfunken zu verhindern. Die Einschraubung hingegen muss eigens gefertigt werden. Zur Versorgung mit Wasserstoff wird dazu ein Übergang an die Einschraubung angeschweißt. Der Brennstoff strömt nachfolgend durch das Röhrchen mit dem kegeligen Ende in den Liner. Ebenso soll an dieser Stelle der Zündfunke auf das kegelige Ende überspringen und somit die Diffusionsflamme aus Wasserstoff und der Verbrennungsluft im Liner entzünden. In weiterer Folge wird dadurch auch das restliche Brennstoff-Luft-Gemisch in der Brennkammer entflammt. Gesteuert wird die Zündeinheit über die bereits vorhandene Zündbox.

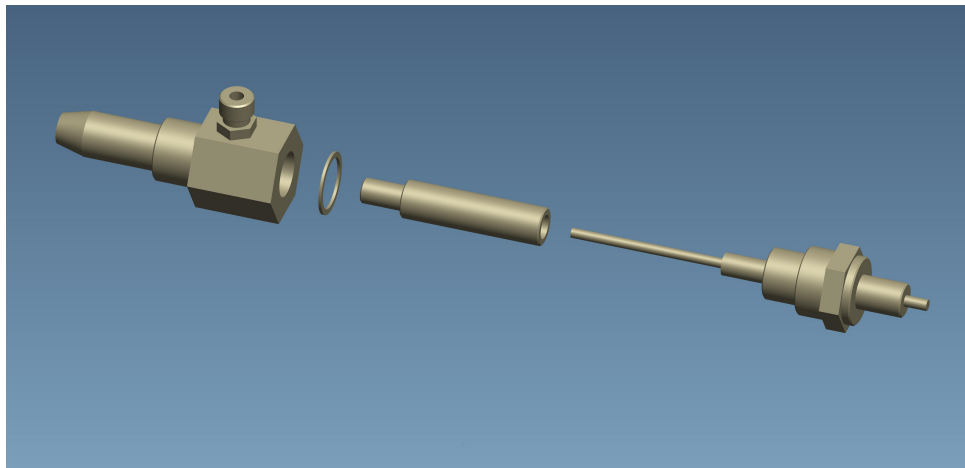


Abbildung 5.10: Zündeinheit

#### 5.2.2 Wechseln der Katalysatoren

Zum wechseln der Katalysatoren wird die Katalysatorbaugruppe von der restlichen Brennkammer getrennt. Die Baugruppe wird dazu mittels der beiden Ringschrauben vom Prüfstand weggehoben und an einer Werkbank in eine vertikalen Lage gebracht. Nachfolgend werden der Sicherungsdraht und die Schrauben, welche zur Vorspannung der Dichtung dienen, gelöst und der Vorspannflansch entfernt. Nun können die einzelnen Bauteile seitlich aus der Halterung entnommen werden. Dabei ist darauf zu achten, dass die Wasserstoffversorgungsleitung sowie die Messleitungen, welche hier nicht abgebildet sind, nicht beschädigt werden. Im letzten Schritt werden die Katalysatoren aus den Katalysatorhalterungen genommen und ausgetauscht.

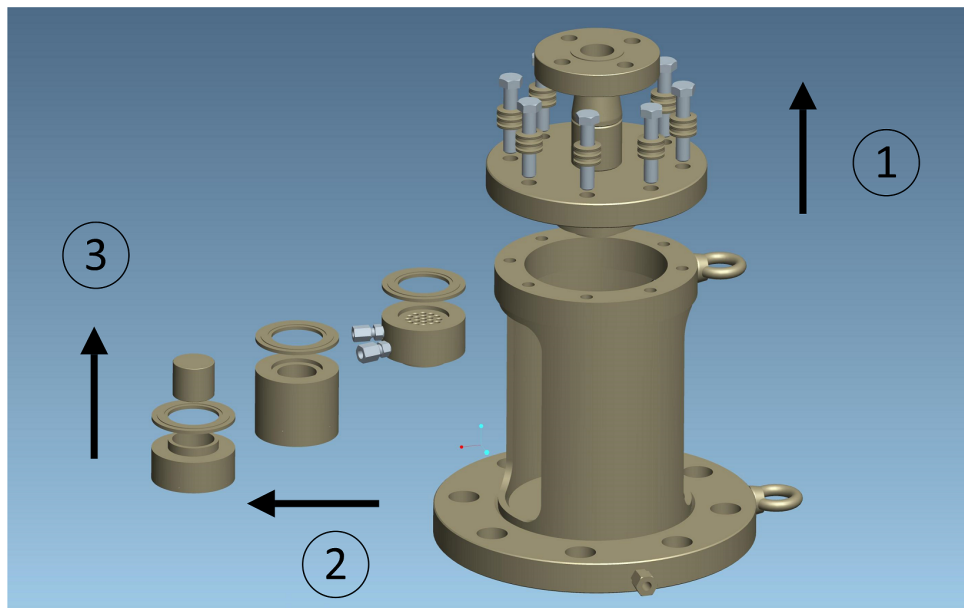


Abbildung 5.11: Wechsel der Katalysatoren

Die Katalysatorbaugruppe wird hinterher in umgekehrter Reihenfolge zusammgebaut. Dabei sollen beim Aufbau der Katalysatorstrecke die Dichtungen nach Möglichkeit wieder an den vorgegangenen Positionen platziert werden. Ebenfalls ist beim Anziehen des Vorspannflansches auf eine gleichmäßige Verteilung der Kräfte zu achten. Dazu sollen die Schrauben bei der Montage in mehreren Schritten jeweils gegenüberliegend gleichmäßig nachgezogen werden. Wie bereits in *Kap. 5.2.1.6* beschrieben, müssen die Federpakete, um die entsprechende Vorspannkraft zu erreichen um 5mm, was  $2\frac{3}{4}$  Umdrehungen der Schrauben entspricht, zusammengedrückt werden. Abschließend wird die gesamte Katalysatorbaugruppe zurück an den Prüfstand gebracht und mit dem Druckmantel sowie dem Lufterhitzer verschraubt.

### 5.2.3 Strömungsverhalten in der Brennkammer

Synchron zur Konstruktion der Brennkammer wurden, um die Sekundär- und Kühlluftleitungen entsprechend dimensionieren zu können und um einen Eindruck des Strömungsverhaltens im gesamten Aufbau zu bekommen, die Temperaturen, Geschwindigkeiten und Massenströme an mehreren Stellen des Aufbaus ermittelt. Die einzelnen Positionen sind in *Abb. 5.12* zu sehen.

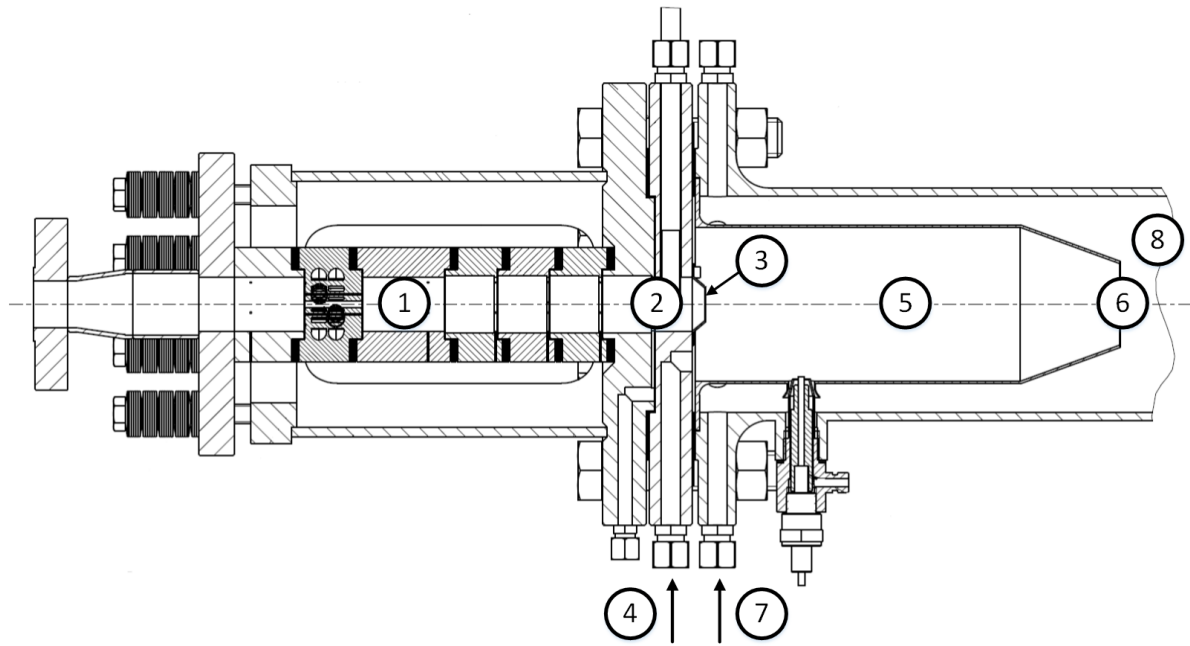


Abbildung 5.12: Berechnungspunkte

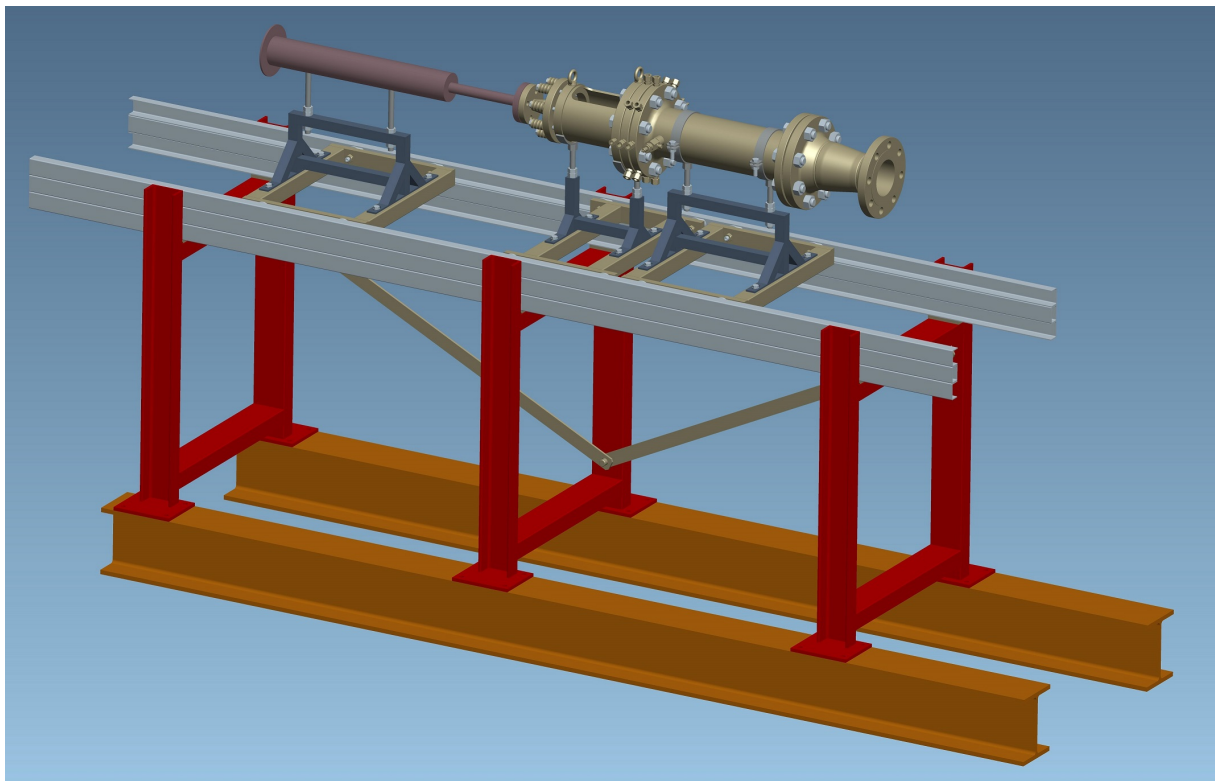
In Tab. 5.6 sind nun die Ergebnisse bei einem Betriebspunkt nach Variante 3 (Tab. 5.1) ausgewiesen. Die thermische Leistung von 25 kW und somit der Brennstoffmassenstrom sowie die Verbrennungsluftverhältnisse bei den einzelnen Punkten wurden dabei vorgegeben. Des Weiteren wurde eine Katalysatoreintrittstemperatur von 100 °C sowie eine Temperatur für die Sekundär- und Kühlluft von 40 °C angenommen. Für die Punkte nach dem Katalysator bis zum Druckmantel, wurden die adiabaten Verbrennungstemperaturen bei den vorherrschenden Verbrennungsluftverhältnissen berechnet. Bei einem Verbrennungsluftverhältnis von  $\lambda = 0,33$  ergibt sich dadurch eine sehr hohe Temperatur am Katalysatoraustritt. Da dort lediglich eine Maximaltemperatur von 900 °C auftreten darf, wurde Punkt 3, welcher die Strömung beim Eintritt in den Liner beschreibt, zusätzlich mit dieser Temperatur berechnet. Wie zu sehen ist, wird durch den geringeren Wert die Strömung deutlich verlangsamt. Durch die gewählten Geometrien für die Sekundär- und Kühlluftbohrungen ergeben sich hier Maximalgeschwindigkeiten von  $\sim 45\text{m/s}$ . Das entspricht bei der gegebenen Temperatur in etwa einer Machzahl von 0,13 und somit liegen die Strömungsgeschwindigkeiten weit im unterkritischen Bereich. Weiters sind in der Tabelle die benötigten Luftmassenströme, welche zur Erreichung der vorgegebenen Verbrennungsluftverhältnisse benötigt werden, ausgewiesen. Durch die fetten Bedingungen in der Katalysatorstrecke, muss hier sehr viel Sekundärluft im Liner zugeführt werden.

$P_{th} = 25 \text{ kW}$		Parameter					
Nr.	Position	Lambda $\lambda$ [-]	Temperatur [°C]	Geschwindigkeit [m/s]	Brennstoff [g/s]	Luft [g/s]	Durchmesser [mm]
1	Katalysator Eintritt	0,33	100,0	6,6	0,2084	2,343	33,0
2	Katalysator Austritt	0,33	1553,8	15,5	0,2084	2,343	33,0
3	Düse (Liner Eintritt)	0,33	1553,8	42,2	0,2084	2,343	20,0
3	Düse (Liner Eintritt)	0,33	900,0	28,2	0,2084	2,343	20,0
4	Sekundärluft	-	40,0	45,3	-	22,51	6x 10,0
5	Liner	3,5	897,2	13,1	0,2084	24,85	90,0
6	Düse (Liner Austritt)	3,5	897,2	42,5	0,2084	24,85	50,0
7	Kühlluft	-	40,0	35,7	-	17,75	6x 10,0
8	Abgas	6,0	574,5	7,8	0,2084	42,60	130,0

Tabelle 5.6: Strömungsverhalten in der Brennkammer

### 5.3 Unterbau des Prüfstandes

Wie eingangs erwähnt, sollen neben der Konstruktion der Brennkammer ebenfalls Änderungen am Prüfstandsaufbau vorgenommen werden. In *Abb. 5.13* ist nun das Gesamtkonzept der Konstruktion dargestellt. Diese setzt sich aus dem Grundgerüst, mehreren Schlitten und den darauf aufgebauten Komponenten zusammen. Durch die gewählte Konstruktion können die Baugruppen beliebig in axialer Richtung verschoben werden. Dadurch können Längenausdehnungen während den Versuchsfahrten ideal kompensiert werden. Durch die Verwendung mehrerer Schlitten ist die Bewegung einzelner Komponenten möglich. Das bietet große Vorteile, wenn Umbauarbeiten an den einzelnen Baugruppen vorzunehmen sind. Im Falle der katalytischen Brennkammer sind hier zwei Schlitten vorgesehen, damit die Katalysatorbaugruppe leicht von der restlichen Brennkammer getrennt werden kann. Das ist nötig um die Katalysatoren, wie in *Kap. 5.2.2* beschrieben, austauschen zu können. Durch den Schlitten ist die Baugruppe nach dem Austausch binnen Sekunden perfekt positioniert und kann wieder mit der restlichen Brennkammer verschraubt werden. Der Lufterhitzer, welcher bei der Vorgängerkonstruktion jedes Mal abgebaut und weggehoben werden müsste, kann nun einfach zur Seite geschoben werden. Ein weiterer Vorteil ist, dass auf die Schlitten die verschiedensten Brennkammerprüfstände bzw. Komponenten aufgebaut werden können.

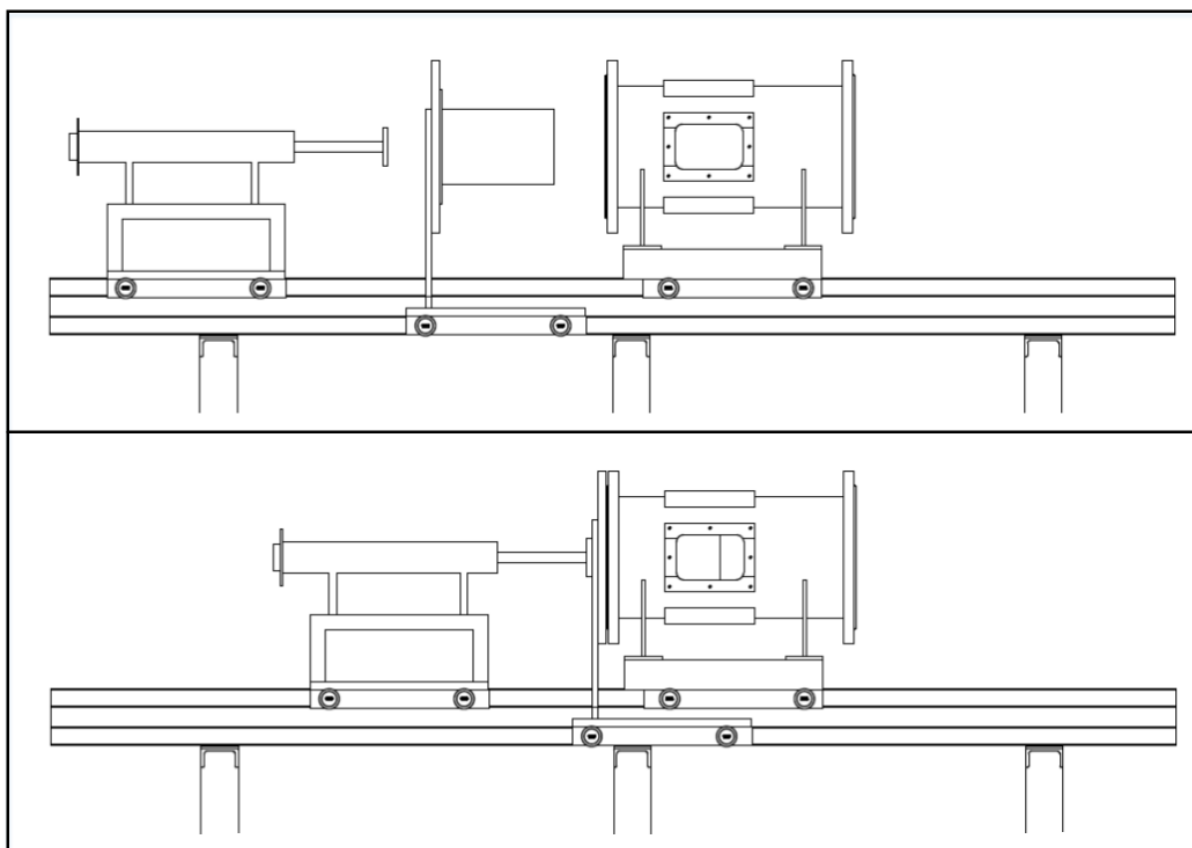


**Abbildung 5.13:** Gesamtaufbau des Prüfstands

Nachfolgend werden das Grundgerüst sowie die Schlitten für die katalytische Brennkammer im Detail beschrieben.

### 5.3.1 Grundgerüst

Das Grundgerüst besteht aus drei identischen Stehern und zwei Schienenpaketen (siehe *Abb. 5.13*). Die Steher sind dabei als Schweißkonstruktion ausgeführt und werden aus handelsüblichen U-Stahl gefertigt. Zur Verbindung der Steher mit den bereits im Labor vorhandenen I-Trägern, sind an dessen Sockel Befestigungsplatten vorgesehen. Diese werden mit den Trägern verschraubt. Um Axiale Belastungen aufnehmen zu können, sind die Steher des Weiteren mit diagonalen Streben verbunden. Die Schienenpakete, welche aus je zwei U-Profilen und einem Hohlprofil bestehen, werden ebenfalls durch eine Schweißverbindung aneinander befestigt. Durch die Verwendung von zwei U-Profilen erhält man zwei separate Schienenebenen. Der daraus resultierende Vorteil ist anschaulich in *Abb. 5.14* dargestellt. In der Abbildung ist schematisch eine Prüfstandskonfiguration mit einem Lufterhitzer, einer Brennkammer (Liner) und einem Druckmantel dargestellt. Alle Komponenten sind dabei auf einem eigenen Schlitten aufgebaut. Damit ein Schlitten nicht kippt, sollte nach Möglichkeit der Schwerpunkt des Aufbaus zwischen dessen Achsen liegen. Um das und ebenfalls einen problemlosen Zusammenbau der Komponenten zu gewährleisten, sind die beiden Schienenebenen notwendig.



**Abbildung 5.14:** Funktionsprinzip der zwei Schienenebenen

Die Schienenpakete werden mittels Schrauben seitlich an die Steher montiert. Als Stütze und zur Aufnahme der Traglast dienen die Querstreben in den Stehern. Hier sind zusätzlich, um ein einwandfreies laufen der Schlitten zu gewährleisten, Abstandhalter zwischen den Schienen und den Querstreben vorgesehen (siehe *Abb. 5.14*). Ansonsten würde die Rolle bzw. der Schlitten an

der Querstrebe anstoßen. Bei den Rollen handelt es sich um Schwerlastrollen der Firma Osborn. Die gewählten Rollen besitzen jeweils eine Traglast von ca. 500kg und sind als Flanschrollen ausgeführt. Dadurch kann eine seitliche Zentrierung der Schlitten sichergestellt werden. Um auch ein Klemmen in seitlicher Richtung zu verhindern, wird eine Toleranz von 2,5mm zwischen dem Flansch und dem U-Profil auf jeder Seite vorgesehen. Durch die geschlossene Form der Schienen kann auch ein Kippen, wie oben angesprochen, nicht zum Herausfallen des Schlittens führen.

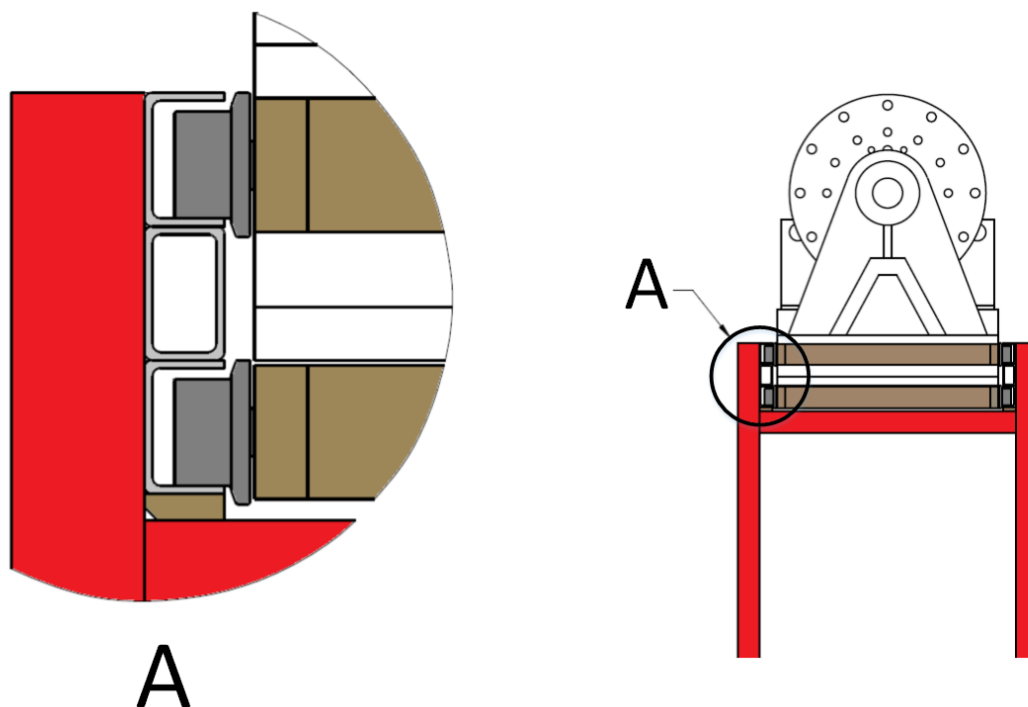


Abbildung 5.15: Detaildarstellung des Schienenpakets

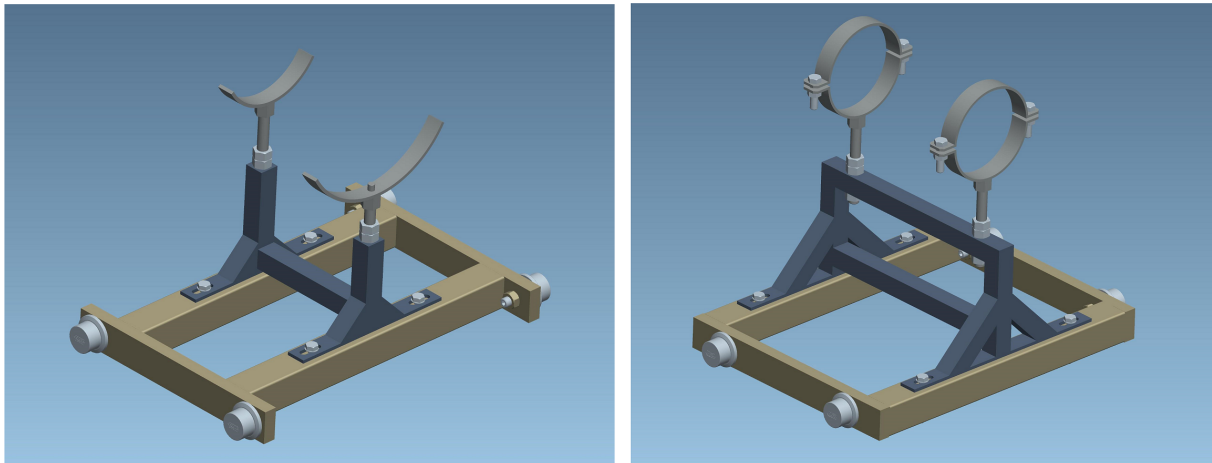
Des Weiteren ist auf der Abbildung zu sehen, dass durch das Hohlprofil im Schienenpaket genügend Platz vorgesehen wird, damit ein Aufbau am unteren Schlitten befestigt werden kann.

### 5.3.2 Schlitten

Im Falle der katalytischen Brennkammer ist ein überschneiden der Schlitten in axialer Richtung nicht vorgesehen. Daher werden hier beide in die obere Schienenebene eingebaut. In *Abb. 5.16* sind die beiden Schlitten mit den zugehörigen Aufbauten für die katalytische Brennkammer abgebildet. Das rechte Bild zeigt dabei den Schlitten für den hinteren Teil der Brennkammer. In diesen wird der Druckmantel fest in die dafür vorgesehenen Schellen eingespannt und somit die gesamte Brennkammer fixiert. Der linke Schlitten hingegen dient rein zur Auflage bzw. Positionierung der Katalysatorbaugruppe. Auf den beiden Halbschellen liegt die Halterung (siehe *Kap. 5.2.1.5*) der Katalysatorstrecke mit dem Flansch und mit dem Ring auf. Um ein axiales Verrutschen der Baugruppe zu verhindern, ist in der Mitte der Schelle für den Flansch ein Bolzen, welche in eine dafür vorgesehene Bohrung im Flansch einrasten soll, vorgesehen. Nach dem Wechseln der Katalysatoren wird die gesamte Baugruppe mit den Kran auf den Schlitten



gehoben. Zur endgültigen Fixierung wird sie an die restliche Brennkammer herangefahren und mit dieser verschraubt.



**Abbildung 5.16:** Schlitten und Aufbauten für die katalytische Brennkammer

Da die beiden Auflageschellen und ebenso die Querträger des Schlittens für die Katalysatorbaugruppe sehr nahe beisammen liegen, wurden hier die Flanschrollen außerhalb der Träger positioniert. Durch die Vergrößerung des Achsabstandes kann somit eine bessere Stabilisierung des Schlittens erreicht werden. Bei dem Zweiten Schlitten ist diese Maßnahme nicht nötig. Um des Weiteren die Katalysatorbaugruppe sowie die restliche Brennkammer exakt auf die Hauptachse des Abgasrohres ausrichten zu können, besteht bei beiden Schlitten bzw. Aufbauten die Möglichkeit geringe Positionskorrekturen vorzunehmen. Durch die Langlöcher bei der Verbindung des Aufbaus mit dem Schlitten kann zu Einen die seitliche Position beeinflusst werden. Zum Anderen kann durch die Variation der Länge der Gewindestange, worauf die Schellen montiert sind, die vertikale Lage bestimmt werden.

In *Abb. 5.17* ist abschließend der Gesamtaufbau im Verbrennungslabor dargestellt. Im linken oberen Bereich des Bildes sind die Ventile zur Regelung der Primär-, Sekundär- und Kühlluft zu sehen. In der Mitte befindet der zuvor präsentierte Aufbau des Prüfstandes und der Brennkammer. Des Weiteren ist noch der Übergang von der Brennkammer in das Abgasrohr ersichtlich.

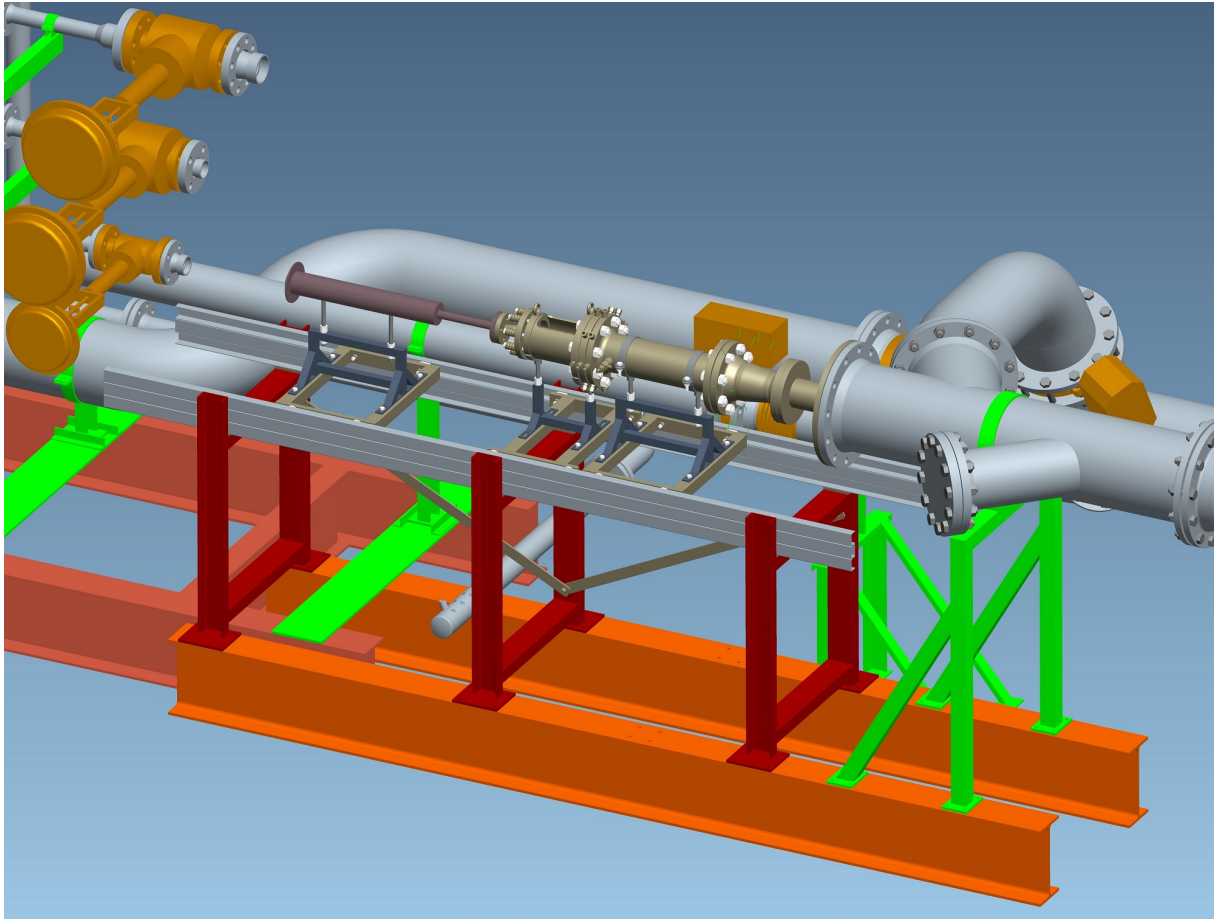


Abbildung 5.17: Gesamtaufbau im Verbrennungslabor

# Kapitel 6

## Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war es ein Brennkammerkonzept zur katalytischen Umsetzung von Wasserstoff auszulegen und zu konstruieren. Dieses soll nachfolgend zur experimentellen Untersuchung verschiedener Katalysatoren im Rahmen eines Forschungsprojekts dienen. Durch die Verwendung von Katalysatoren, wodurch ein Brennstoff-Luft-Gemisch bereits bei sehr niedrigen Temperaturen stabil verbrannt werden kann, werden bei den Versuchen sehr geringe Stickoxidwerte erwartet. Da Wasserstoff als Brennstoff verwendet wird, kann weiters die Produktion der Schadstoffe  $CO$  und  $CO_2$  ausgeschlossen werden. Zusammenfassend handelt es sich um ein schadstoffarmes Brennkammerkonzept, welches in Gasturbinen eingesetzt werden kann.

Um ein entsprechendes Gesamtkonzept erarbeiten zu können, wurden zu Beginn der Arbeit geeignete Katalysatoren ausgewählt. Als Entscheidungsgrundlage kamen Erkenntnisse aus der einschlägigen Literatur, ein Simulationsprogramm der Firma SES-Tec sowie die Informationen des Katalysatorherstellers zum Einsatz. Für die nachfolgende Konstruktion waren vor allem die Abmessungen der Katalysatoren von Bedeutung. Da sich die Abschätzung der Katalysatorlänge sehr schwierig gestaltete, wurde beschlossen mehrere kurze Katalysatoren, welche bei Bedarf seriell aneinander gereiht werden können, zu bestellen. Des Weiteren wurden unterschiedliche Katalysatoranordnungen hinsichtlich dem reaktiven Material, dem Washcoat, dem Katalysatorträgermaterial, der Zellenanzahl und der Beladung ausgewählt.

In einem weiteren Schritt wurden, zur Sicherstellung eines homogenen Brennstoff-Luft-Gemischs sowie eines gleichmäßigen axialen Geschwindigkeitsprofils vor dem Eintritt in die Katalysatoren, mehrere Drallerzeuger- und Micro-Mixer-Geometrien numerisch untersucht. Es hat sich dabei herausgestellt, dass der Micro-Mixer am besten den Anforderungen entspricht. Zusätzlich wurde bei den Auswertungen der Simulationen die Mischrohrlänge zwischen dem Micro-Mixer und dem ersten Katalysator bestimmt.

Aus den gewonnenen Erkenntnissen und den gewählten Abmessungen wurde abschließend ein geeignetes Brennkammerkonzept für die katalytische Verbrennung ausgearbeitet. Die Brennkammer wurde dahingehend gestaltet, dass sowohl ein mageres als auch ein fettes Brennstoff-Luft-Gemisch durch die Katalysatoren geschickt werden kann. Im Falle eines fetten Gemischs wird der in der Katalysatorstrecke unverbrannte Wasserstoff durch eine nachträgliche Einbringung der Sekundärluft vollständig umgesetzt. Der gesamte Aufbau kann an die bereits im Verbrennungslabor des Instituts vorhandenen Versorgungs-, Mess- und Regeleinheiten angeschlossen werden.

Sämtliche benötigte Komponenten und Bauteile, welche zur Realisierung des Prüfstands benötigt werden, sind in einer Materialliste zusammengefasst. Ebenso wurden für jene Komponenten, die intern oder extern noch gefertigt werden müssen, entsprechende Fertigungszeichnungen gestaltet.

Nach einem erfolgreichen Zusammenbau des Prüfstands kann mit den ersten Testversuchen begonnen werden. Wie sich bei der Literaturrecherche herausstellte, kann es bei wasserstoffreichen Brennstoffen, bei einem mageren Verbrennungsluftverhältnis, zu superadiabaten Verbrennungstemperaturen kommen. Das bedeutet, dass partiell Temperaturen weit über der eigentlichen adiabaten Verbrennungstemperatur des Brennstoff-Luft-Gemischs entstehen können und hat die Zerstörung des Katalysators zur Folge. Da im Rahmen dieses Projekts reiner Wasserstoff zur Anwendung kommt, besteht vor allem hier die Gefahr, dass dieses Phänomen eintritt. Daher sollten die ersten Versuche vorzugsweise unter fetten Bedingungen im Katalysator durchgeführt werden.

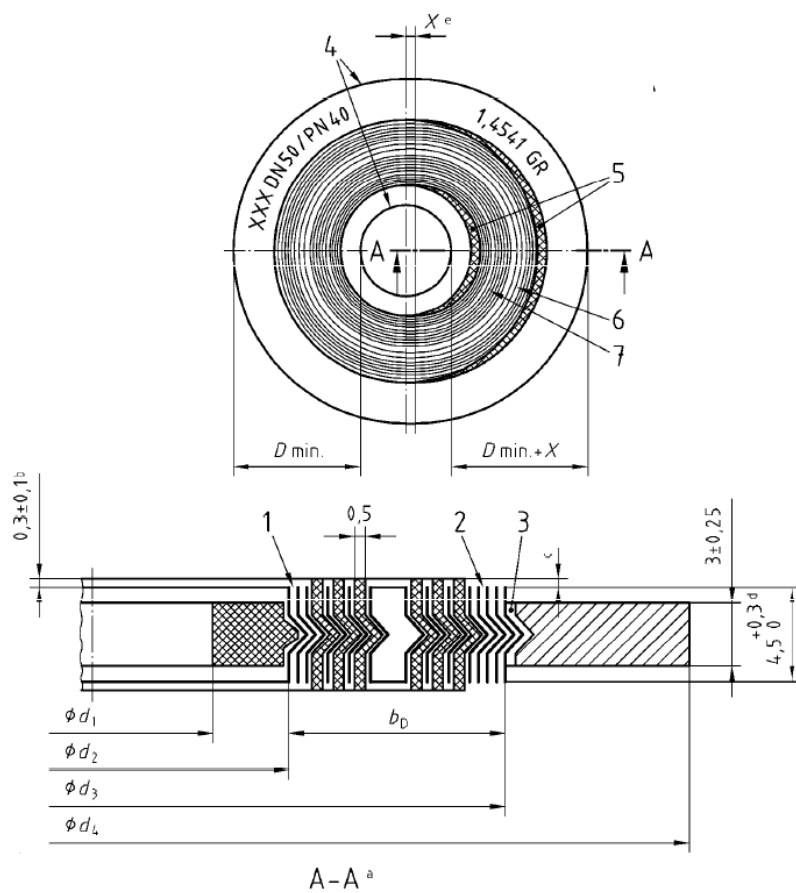
# Literaturverzeichnis

- [1] WARNATZ, Jürgen: Verbrennungs-Modellierung: Gegenwärtige Grenzen und zukünftige Möglichkeiten. In: *Energie und Umwelt*. Springer, 2000, S. 207–223
- [2] LEFEBVRE, Arthur H. ; BALLAL, Dilip R.: *Gas Turbine Combustion: Alternative Fuels and Emissions*. 3rd. CRC Press, 2010
- [3] DALLA BETTA, Ralph A.: Catalytic combustion gas turbine systems: the preferred technology for low emissions electric power production and co-generation. In: *Catalysis Today* 35 (1997), Nr. 1, S. 129–135
- [4] HOCHENAUER, Christoph: *Wärmetechnik 2*. Vorlesungsskript, 2013. – TU Graz
- [5] EICHLSEDER, Helmut ; KLELL, Manfred: *Wasserstoff in der Fahrzeugtechnik: Erzeugung, Speicherung, Anwendung*. 1. Aufl. Springer-Verlag, 2008
- [6] BORM, Oliver: *Verbrennung in Gasturbinen*. Vorlesungsskript, 2014. – TU Graz
- [7] PFEFFERLE, WC ; CARRUBBA, RV ; HECK, RM ; ROBERTS, GW: Catalytic Combustion: A New Process for Low Emissions Fuel Conversion. In: *ASME Paper* (1975), Nr. 75-WA/Fu-1
- [8] SMITH, Lance ; KARIM, Hasan ; ETEMAD, Shahrokh ; PFEFFERLE, William C. u. a.: *The Gas Turbine Handbook*. Dr. Lance Smith, Dr. Hasan Karim, Dr. Shahrokh Etemad, Dr. William C. Pfefferle, 2006
- [9] APPEL, Christoph: *Katalytisch stabilisierte Verbrennung von Wasserstoff-Luft-Gemischen über Platin in laminaren und turbulenten Kanalströmungen*, ETH Zürich, Diss., 2002
- [10] JOOS, Franz: *Technische Verbrennung*. 1. Aufl. Springer Verlag, 2006
- [11] SCHLEGEL, A: *Experimentelle und numerische Untersuchung der NO<sub>x</sub>-Bildung bei der katalytisch stabilisierten und der nicht-stabilisierten, mageren Vormischverbrennung*, ETH Zürich, Diss., 1994
- [12] MANTZARAS, John ; LIEUWEN, Tim C. (Hrsg.) ; YETTER, Richard (Hrsg.) ; YANG, Vigor (Hrsg.): *Synthesis Gas Combustion*. CRC Press, 2009
- [13] NATIONAL: *Catalytic Converter*. <http://www.national.co.uk/information/catalytic-converters.aspx>, . – [Online: Stand 18. August 2015]
- [14] EMITEC: *Katalysatorträger*. <http://www.emitec.com/emitec/>, . – [Online: Stand 5. April 2015]

- [15] KUPER, WJ ; BLAAUW, M ; VAN DER BERG, F ; GRAAF, GH: Catalytic combustion concept for gas turbines. In: *Catalysis Today* 47 (1999), Nr. 1, S. 377–389
- [16] LYUBOVSKY, Maxim ; SMITH, Lance L. ; CASTALDI, Marco ; KARIM, Hasan ; NENTWICK, Brian ; ETEMAD, Shahrokh ; LAPIERRE, Rene ; PFEFFERLE, William C.: Catalytic combustion over platinum group catalysts: fuel-lean versus fuel-rich operation. In: *Catalysis Today* 83 (2003), Nr. 1, S. 71–84
- [17] KRAMER, Jeffrey F. ; REIHANI, Seyed-AS ; JACKSON, Gregory S.: Low-temperature combustion of hydrogen on supported Pd catalysts. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 29 (2002), Nr. 1, S. 989–996
- [18] HARUTA, M ; SANO, H: Catalytic combustion of hydrogen I—Its role in hydrogen utilization system and screening of catalyst materials. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 6 (1981), Nr. 6, S. 601–608
- [19] SCHULTZE, Marco ; MANTZARAS, John: Hetero-/homogeneous combustion of hydrogen/air mixtures over platinum: Fuel-lean versus fuel-rich combustion modes. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 38 (2013), Nr. 25, S. 10654–10670
- [20] GRIFFIN, Timothy ; WEISENSTEIN, Wolfgang ; SCHERER, Viktor ; FOWLES, Martin: Palladium-catalyzed combustion of methane: Simulated gas turbine combustion at atmospheric pressure. In: *Combustion and flame* 101 (1995), Nr. 1, S. 81–90
- [21] OZAWA, Y ; FUJII, T ; TOCHIHARA, Y ; KANAZAWA, T ; SAGIMORI, K: Test results of a catalytic combustor for a gas turbine. In: *Catalysis today* 45 (1998), Nr. 1, S. 167–172
- [22] CANTERA: *Cantera Dokumentation*. <http://www.cantera.org/docs/sphinx/html/index.html>, . – [Online: Stand 18. April 2015]
- [23] DEUTSCHMANN, O: *Reaktionsmechanismus*. <http://cantera.googlecode.com/svn/cantera/trunk/data/inputs/ptcombust.cti>, . – [Online: Stand 18. April 2015]
- [24] NAZRI, Mohammad ; JUSOFF, Kamarudin ; MOHAMED SEROLEH, Osman ; MOHD SHAFUL ASHRUL, Ishak: Combustor aerodynamic using radial swirler. (2011)
- [25] YORK, William D. ; ZIMINSKY, Willy S. ; YILMAZ, Ertan: Development and testing of a low NO<sub>x</sub> hydrogen combustion system for heavy-duty gas turbines. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 135 (2013), Nr. 2, S. 022001
- [26] ANSYS: *ANSYS Fluent Theory Guide*. <http://148.204.81.206/Ansys/150/ANSYS2013>. – [Online: Stand 20 Juni 2015]
- [27] LUCEFIN: *Werkstoffdatenblatt Edelstahl 1.4571*. [http://www.lucefin.com/wp-content/files\\_mf/1.4571a316ti31.pdf](http://www.lucefin.com/wp-content/files_mf/1.4571a316ti31.pdf), . – [Online: Stand 24. April 2015]

# Anhang A

## Garlock Spiraldichtung



### Key

- <sup>a</sup> see Table 1 for details
- <sup>b</sup> protrusion minimum of 0,2 mm
- <sup>c</sup> Gasket shall not compress such that metal to metal contact between flange and guide rings is achieved.
- <sup>d</sup> width (of profiled metal of the sealing element)
- <sup>e</sup> tolerance: ≤ DN 200: max. 0,2 mm,  
> DN 200: max. 0,4 mm  
This parameter controls the amount by which the ring might protrude into the pipe bore.
- 1 2 to 3 empty wraps
- 2 3 to 5 empty wraps
- 3 central groove ± 0,1 mm
- 4 sharp edges removed
- 5 minimum of four welding points for each
- 6 metal thickness (0,2 ± 0,02) mm
- 7 thickness as appropriate to filler type  
graphite ash content < 2 %, PTFE filler to contain no re-cycled material and may be either sintered or non-sintered.

Abbildung A.1: Garlock Spiraldichtung