

Masterarbeit

Untersuchungen zum Einsatzpotential von CFD-Methoden bei der Auslegung von SCR-Anlagen

Vorgelegt von:

Heide Rothwangl-Heber
9435135

Betreuer/Gutachter:

ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Christian Weiß
Dipl.-Ing. Dr. techn. Hermann Maier

Leoben, Oktober 2006

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt und mich auch sonst keiner unerlaubten Hilfsmittel bedient habe.

AFFIDAVIT

I declare in lieu of oath, that I wrote this thesis and performed the associated research myself, using only literature cited in this volume.

Datum

Unterschrift

DANKSAGUNG

Danke an Herrn ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Christian Weiß und an Herrn Dipl.-Ing. Dr. techn. Hermann Maier für Ihre Unterstützung, Hilfestellung und wertvolle Anleitung bei der Durchführung dieser Arbeit.

Danke an Herrn ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Josef Draxler.

Danke an alle Mitarbeiter des Institutes für Verfahrenstechnik des Industriellen Umweltschutzes.

Danke an meine Eltern.

Danke an Gundolf und meine Kinder Laura und Artur.

Kurzfassung

Untersuchung zum Einsatzpotential von CFD-Methoden bei der Auslegung von SCR-Anlagen

In der vorliegenden Arbeit wird ein grober Überblick über die Möglichkeiten der Entstickung von Abgasen mittels verfahrenstechnischer Sekundärmaßnahmen gegeben. Im Weiteren wird die Methode der selektiven katalytischen Reduktion (SCR) genauer untersucht.

Als Methode zur Charakterisierung von Strömungen in verfahrenstechnischen Apparaten findet die numerische Strömungsmechanik (*Computational Fluid Dynamics*) CFD immer breitere Anwendung. Mit dem CFD-Programm SWIFT 3.1 und den eingebauten Modulen Porosität, heterogene Katalyse und Speziestransport besteht die Möglichkeit eine Kombination aus 3D-Strömungsberechnung und chemischen Reaktionsprozessen in SCR-Anlagen zu simulieren.

Es werden die Grundlagen der numerischen Strömungsmechanik und die theoretischen Hintergründe der einzelnen Module zur Simulation von Wärmetauschern und Katalysatoren in SCR-Anlagen vorgestellt. Weiters wurde anhand der Hausmüllverbrennungsanlage Lauta die Anwendbarkeit und Praxistauglichkeit des Simulationsverfahrens demonstriert und dokumentiert.

Abstract

Investigations of the Potential of CFD-Methods for Use in the Design of SCR-Systems

In this work a rough overview of the possibilities of denitrification of exhaust gases is given by means of end-of-pipe off-gas treatment. Especially the method of selective catalytic reduction (SCR) is investigated.

As a method for flow simulation of process engineering plants Computational Fluid Dynamics (CFD) finds broad application. For the first time it is possible to simulate combinations of 3D-fluid dynamics and chemical processes in SCR-systems with the CFD-program SWIFT 3.1 and the inserted modules Porosity, Aftertreatment, and Species Transport.

The CFD related fundamentals and the theoretical background of the individual modules for simulating the heat exchanger and catalysts in SCR-systems are presented. Further on the basis of the domestic garbage combustion plant Lauta the applicability of the CFD-program SWIFT 3.1 was demonstrated and documented.

Inhaltsverzeichnis

| | Seite |
|---|--------------|
| 1 EINLEITUNG | 5 |
| 2 SELEKTIVE KATALYTISCHE REDUKTION (SCR- ODER DENOX- VERFAHREN)..... | 7 |
| 2.1 Reaktorschaltungen..... | 7 |
| 2.1.1 Entstickung mittels „High-Dust Schaltung“..... | 7 |
| 2.1.2 Entstickung mittels „Low-Dust Schaltung“ | 8 |
| 2.1.3 Hoch- und Niedertemperaturanwendungen..... | 9 |
| 2.2 Ammoniakaufgabe..... | 9 |
| 2.3 Katalysatorwerkstoffe und -formen | 9 |
| 2.4 Reaktionsmechanismen | 12 |
| 2.4.1 NO _x -Abbaumechanismus nach Tronconi..... | 14 |
| 3 NUMERISCHE STRÖMUNGSMECHANIK - CFD | 17 |
| 3.1 Grundlagen der Numerischen Strömungsmechanik..... | 17 |
| 3.1.1 Vorteile der numerischen Strömungsmechanik | 17 |
| 3.1.2 Anwendungsgebiete | 17 |
| 3.1.3 Ablauf einer CFD-Untersuchung..... | 18 |
| 3.1.3.1 Definition der Simulationsziele | 18 |
| 3.1.3.2 Einschränkung des Untersuchungsbereich..... | 18 |
| 3.1.3.3 Entwurf und Erstellung des Gitters..... | 18 |
| 3.1.3.4 Aufsetzen eines numerischen Modells..... | 18 |
| 3.1.3.5 Berechnung der Lösung | 18 |
| 3.1.4 Limitationen der Methode | 19 |
| 3.2 Grundgleichungen der numerischen Strömungsmechanik..... | 19 |
| 3.3 Transportgleichungen | 20 |
| 3.3.1 Allgemeine Transportgleichung | 20 |
| 3.3.2 Massenbilanz | 20 |
| 3.3.3 Impulsbilanz | 21 |
| 3.3.4 Energiebilanz | 21 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 3.3.5 | Speziestransport | 22 |
| 3.3.6 | Zustandsgleichung für ideale Gase | 22 |
| 3.3.7 | Turbulenzmodellierung | 23 |
| 3.3.7.1 | k- ϵ Model | 25 |
| 3.3.7.2 | <i>Reynolds Stress Model (RSM)</i> | 26 |
| 3.3.7.3 | AVL HTM Model | 27 |
| 3.3.8 | Randbedingungen für die Turbulenzgrößen | 28 |
| 3.4 | Diskretisierung | 28 |
| 3.4.1 | Definition der Strömungsberandung | 28 |
| 3.4.1.1 | <i>Inlet Boundaries</i> | 29 |
| 3.4.1.2 | <i>Outlet Boundaries</i> | 29 |
| 3.4.1.3 | Symmetry Boundaries | 29 |
| 3.4.1.4 | <i>Wall Boundaries</i> | 29 |
| 3.4.1.5 | <i>Pressure Boundaries</i> | 29 |
| 3.4.2 | Zeitschrittverfahren | 29 |
| 3.4.3 | Diskretisierung des Zeitterms | 30 |
| 3.4.4 | Diskretisierung des Berechnungsgebietes | 31 |
| 3.4.4.1 | Finite-Volumen-Methode (FVM) | 31 |
| 3.4.5 | Diskretisierung der konvektiven und diffusiven Flüsse der Transportgleichungen | 31 |
| 3.4.5.1 | Diskretisierungsansätze | 32 |
| 3.4.6 | Numerische Diffusion | 32 |
| 3.4.7 | Lösung der Erhaltungsgleichungen (SIMPLE-Algorithmus) | 32 |
| 3.5 | Beurteilung der Ergebnisse | 33 |
| 4 | MODUL POROSITY | 34 |
| 4.1 | Grundlagen und Strömungswiderstand | 34 |
| 4.2 | Porositätsmodelle | 34 |
| 4.3 | Porosität mit Wärmeübergang | 36 |
| 4.4 | Turbulenz im porösen Block | 36 |
| 5 | MODUL SPECIES TRANSPORT | 38 |
| 6 | MODUL AFTERTREATMENT | 39 |
| 6.1 | Grundlagen | 39 |
| 6.2 | Differentialgleichungssystem für die heterogene Kinetik | 40 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 6.3 | Berechnung der chemischen Reaktionsrate..... | 41 |
| 6.3.1 | Klebekoeffizient..... | 43 |
| 6.4 | Transportgleichungen..... | 43 |
| 7 | FALLBEISPIEL SCR-ANLAGE LAUTA..... | 44 |
| 7.1 | Ausgangssituation..... | 44 |
| 7.2 | Vorgangsweise..... | 47 |
| 7.2.1 | Wärmetauscher..... | 47 |
| 7.2.2 | NH ₃ -Eindüsung..... | 52 |
| 7.2.2.1 | 3D-Fall ohne Eindüsung – Test der verschiedenen Turbulenzmodelle..... | 53 |
| 7.2.2.2 | 3D-Fall mit NH ₃ -Eindüsung..... | 56 |
| 7.2.3 | Katalysator..... | 60 |
| 8 | ZUSAMMENFASSUNG..... | 66 |
| 9 | VERZEICHNISSE..... | 68 |
| 9.1 | Literatur..... | 68 |
| 9.2 | Abbildungen..... | 70 |
| 9.3 | Tabellen..... | 72 |
| 9.4 | Symbole..... | 73 |
| 10 | ANHANG..... | I |
| 10.1 | Eingabedaten zur Berechnung des Wärmetauschers..... | I |
| 10.1.1 | Modul <i>Porosity</i> | I |
| 10.2 | Eingabedaten zur Berechnung der Katalysatoren..... | III |
| 10.2.1 | Modul <i>Porosity</i> | III |
| 10.2.2 | Modul <i>Species Transport</i> | IV |
| 10.2.2.1 | <i>Transport Model</i> | IV |
| 10.2.2.2 | 2D-Output..... | V |
| 10.2.2.3 | 3D-Output..... | VI |
| 10.2.2.4 | <i>Additional Input-Data – General Species Transport Model</i> | VI |
| 10.2.3 | Modul <i>Aftertreatment</i> | VIII |
| 10.2.3.1 | <i>Surface Species</i> - Oberflächenspezies..... | VIII |
| 10.2.3.2 | <i>Catalyst Specification</i> – Katalysatorspezifikation..... | IX |
| 10.2.3.3 | <i>Stoichiometry Specification</i> – Spezifikation der Stöchiometrie..... | XI |
| 10.2.3.4 | <i>Kinetic Parameters Specification</i> – Eingabe der Kinetikparameter..... | XI |

| | | |
|----------|--|-----|
| 10.2.3.5 | <i>Solution Specification</i> – Lösungsparameter | XII |
| 10.2.3.6 | <i>Reaction Solver Flags</i> | XIV |
| 10.2.3.7 | 2D-Output | XIV |
| 10.2.3.8 | 3D-Output | XIV |

1 Einleitung

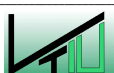
Die vorliegende Diplomarbeit ist im Rahmen des Forschungsprojektes „Untersuchungen zum Einsatzpotential von CFD- Methoden bei der Auslegung von SCR-Anlagen“ in Zusammenarbeit mit der Austrian Energy & Environment AG und der Montanuniversität Leoben entstanden. Ziel der Arbeit war eine Dokumentation der im CFD-Code SWIFT 3.1 enthaltenen Module zur Berechnung von SCR-Anlagen. Inhalt und Gestaltung sind auf den praktischen Einsatz und den theoretischen Hintergrund der numerischen Strömungssimulation ausgerichtet. Die Grundlagen können im Rahmen der vorliegenden Arbeit nur stark vereinfacht dargestellt werden. Es ist aber mit Hilfe der angeführten Literaturstellen möglich, weitergehende Fragestellungen zu beantworten. Ein Überblick über die verwendeten Module und eine grobe Übersicht über die Katalysatorreaktionen wird gegeben.

Um die gesetzlich vorgegebenen Grenzwerte als Tagesmittelwerte für Stickoxidemissionen (NO und NO_2) laut Abfallverbrennung-Sammelverordnung von 200 mg/m^3 bei einer Nennkapazität bis $2 t_{\text{Abfall/h}}$, 150 mg/m^3 bei 2 bis 6 $t_{\text{Abfall/h}}$ und von 70 bzw. 100 mg/m^3 für Neuanlagen bzw. bestehende Anlagen mit mehr als 6 $t_{\text{Abfall/h}}$ einhalten zu können, werden Primär- und Sekundärmaßnahmen zur Rauchgasentstickung eingesetzt. Stickstoffverbindungen in Abgasen kommen im Wesentlichen als Stickstoffmonoxid (NO), Stickstoffdioxid (NO_2), Distickstofftrioxid (N_2O_3), Distickstofftetroxid (N_2O_4), salpetrige Säure (HNO_2) oder als Salpetersäure (HNO_3) vor, wobei im Rauchgas bei Kesselanlagen etwa 95% NO enthalten sind.

Bei Verbrennungsprozessen ist man bestrebt durch so genannte feuerungstechnische Primärmaßnahmen eine größtmögliche Reduzierung der Stickoxidemissionen zu bewirken. Primärmaßnahmen, wie Homogenisierung des Brenngutes, Rauchgasrückführung und Stufung und Regelung der Luftzugabe, haben ein Reduktionspotential von 10 bis 20%. Unter den Sekundärmaßnahmen sind die Verfahren der selektiven Reduktion bisher am weitesten verbreitet, wobei zwischen nichtkatalytischen und katalytischen Verfahren unterschieden wird. Beide Verfahren arbeiten mit Ammoniak, ammoniakalischer wässriger Lösung, Harnstoff und ähnlichen Reduktionsmitteln und reduzieren die Stickstoffoxide zu N_2 und H_2O .

Tabelle 1.1: Sekundärmaßnahmen nach Thomé-Kozmiensky (1994)

| Maßnahmen | Reduktionspotential | Technische Reife |
|---|---------------------|-------------------|
| Sekundärmaßnahmen | | |
| Selektive nicht katalytische Reduktion (SNCR) | bis etwa 80% | Stand der Technik |
| Selektive katalytische Reduktion (SCR) | bis etwa 90% | Stand der Technik |
| Aktivkoksverfahren | bis etwa 60% | in Erprobung |
| Nassverfahren | bis etwa 70% | in Erprobung |



Die Selektive katalytische Reduktion (SCR) wird großtechnisch in Restmüllverbrennungsanlagen und Kraftwerken zur Rauchgasbehandlung eingesetzt, wobei hier eine Chemisorption an sauren Zentren nach dem Eley-Rideal-Mechanismus erfolgt. Die Reaktionspartner reagieren laut Görner et al. (2002) aus der Gasphase nach einer Reaktion pseudoerster Ordnung in Bezug auf NO. Als dominante Reaktion und zur Vereinfachung der komplizierten chemischen Umsätze wird die Reaktion $4 \text{ NO} + 4 \text{ NH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow 4 \text{ N}_2 + 6 \text{ H}_2\text{O}$ herangezogen.

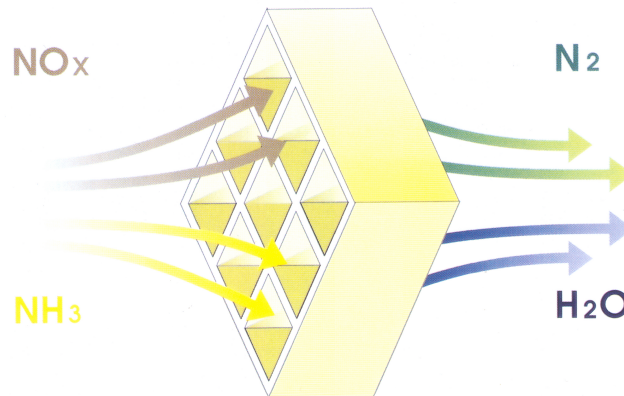


Abbildung 1.1: Kontaktreaktion am Katalysator (DENOX Katalysatoren, CERAM Porzellanfabrik Frauenthal GmbH)

Inhomogenitäten der Strömung im Katalysatorbereich bewirken eine Verschlechterung des Wirkungsgrades, was zu Nichteinhalten der Grenzwerte der Schadstoffemissionen führen kann. Eine Vergleichmäßigung der Strömung kann wesentlich zur Optimierung der Abbauleistung, zur Senkung der Betriebskosten und zur Erhöhung der Lebensdauer der SCR-Anlage beitragen.

Die numerische Strömungsmechanik CFD (Computational Fluid Dynamics) als Methode zur Strömungssimulation von Apparaten in der Verfahrenstechnik bietet die Möglichkeit einer Apparateoptimierung. Es besteht daher die Möglichkeit numerisch am PC die Strömung zu charakterisieren, Schief lagen und Unregelmäßigkeiten zu entdecken. Es können schon während der Planung, relativ kostengünstig und mit wenig Aufwand wertvolle Hinweise auf mögliche Konstruktionsfehler gefunden werden. Anlagenteile können ohne aufwendige experimentelle Versuche hinsichtlich ihrer Wirkungsweise optimiert werden.

Auch ist es möglich die Gasphasenströmung hinsichtlich Homogenität und Schief lagen im Katalysatorbereich großer verfahrenstechnischer Anlagen zu optimieren, was mit anderen Standardauslegungstools nicht möglich ist.

2 Selektive katalytische Reduktion (SCR- oder DeNO_x-Verfahren)

Die in Japan von der Firma Mitsui Mining Inc. entwickelte Technik der selektiven katalytischen Reduktion (SCR-Verfahren) zur Abgasentstickung wurde 1989 in Europa erstmals in der Müllverbrennungsanlage Wien-Spittelau eingesetzt und wird auch in der im Folgenden vorgestellten Anlage in Lauta verwendet.

Prinzipielle Bauteile einer DeNO_x-Anlage sind der Wärmetauscher zur Abgasvorwärmung, die Ammoniakendüse zur gleichmäßigen Einbringung von Ammoniak bzw. Ammoniakwasser, Mischsysteme zur Homogenisierung der Strömung und der Temperatur und meist drei seriell geschaltete Katalysatorblöcke zum Abbau von NO_x.

DeNO_x-Anlagen kommen hauptsächlich in Müllverbrennungsanlagen und Kraftwerken zum Einsatz, wobei hier auch eine Dioxinabscheidung möglich ist.

2.1 Reaktorschaltungen

Nach Schultes, M. (1996) bestehen folgende Möglichkeiten die Katalysatorstufe zum Abbau von NO_x innerhalb einer Abgasreinigungsanlage zu schalten:

2.1.1 Entstickung mittels „High-Dust Schaltung“

Bei der so genannten „High-Dust Schaltung (

Abbildung 2.1) herrschen relativ hohe Temperaturen (größer 300°C), man spricht auch von einer heterogenen Katalyse, da der Katalysator und die reagierenden Stoffe in unterschiedlichen Aggregatzuständen vorliegen.

Um problemlos den Staub passieren zu lassen, müssen die Katalysatoren verhältnismäßig große Strömungskanäle besitzen. Durch relativ kurze Anlaufstrecken und ungenügende Homogenisierung der Strömung kann es zu einer NH₃- bzw. NO_x-Schieflage im Anströmungsquerschnitt kommen, wodurch der Konzentrationsverlauf Spitzen aufweisen kann, die auf die Gestaltung des Rauchgaskanals vor dem Katalysator zurückgeführt werden können.

Es besteht die Möglichkeit, dass SO₂ zu SO₃ oxidiert wird, was zu Aktivitätsverlusten des Katalysators durch Ablagerung von Ammoniumsulfat oder –hydrogensulfat führen kann. Im Weiteren können Schwermetalle und desaktivierendes Natrium, Kalium, Magnesium und Kalzium den Katalysator vergiften. Aus diesen Gründen ergeben sich als Richtwert 76.000 Betriebsstunden für die Standzeiten bei industriellem Einsatz des Katalysators.



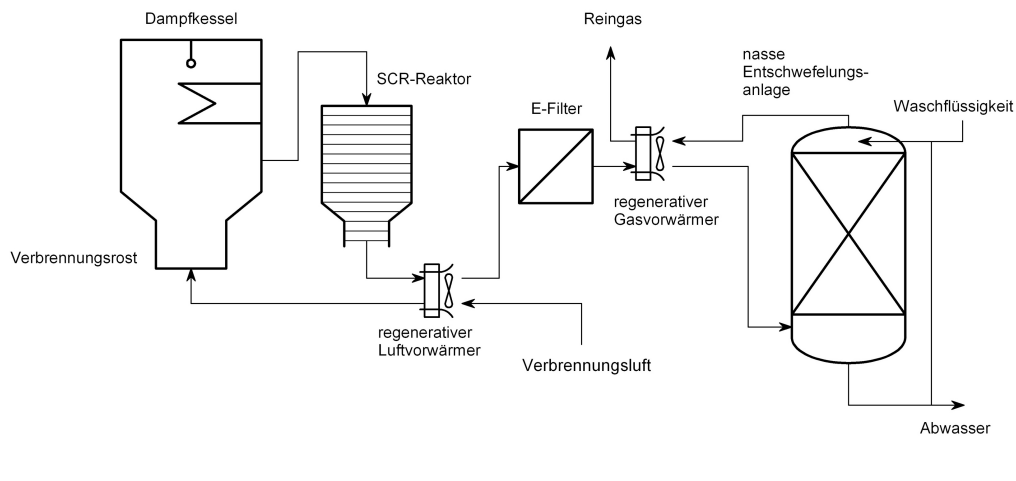


Abbildung 2.1: High-Dust Schaltung nach Schultes, M. (1996)

2.1.2 Entstickung mittels „Low-Dust Schaltung“

Erfolgt die Entstickung nach der Entstaubung und Entschwefelung so handelt es sich um eine „Low-Dust Schaltung“ (Abbildung 2.2). Da das Abgas an dieser Stelle im Abgaskanal bereits entstaubt ist können diese Katalysatoren engere Strömungskanäle erhalten, wodurch eine um ca. 50% größere spezifische Reaktionsoberfläche als bei der „High-Dust Schaltung“ realisiert werden kann. Allerdings müssen die Rauchgase entweder in einem heißgehenden Filterapparat entstaubt und im Anschluss an die Nassentschwefelung, bei der die Rauchgastemperatur auf bis zu 50°C abfällt, durch einen zusätzlichen Wärmetauscher wieder auf die vom Katalysator geforderte Betriebstemperatur (größer 200°C) angehoben werden.

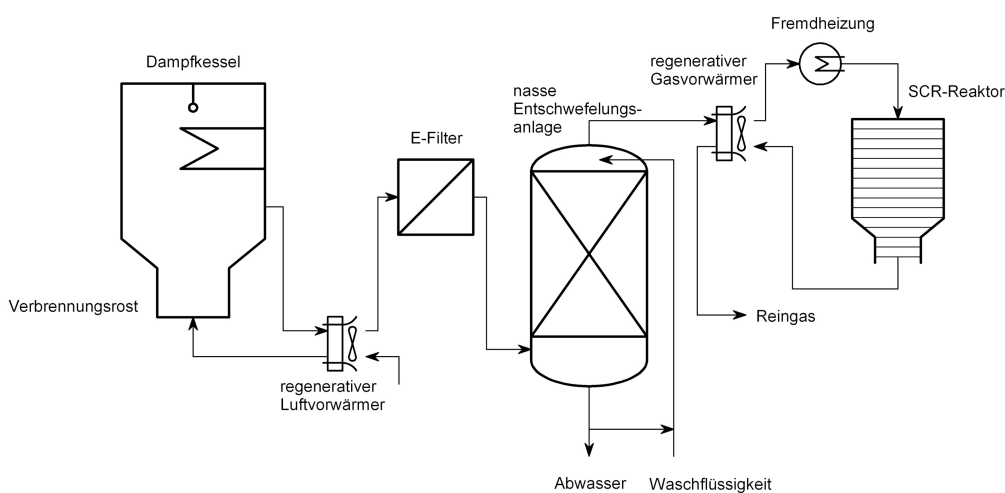


Abbildung 2.2: Low-Dust Schaltung nach Schultes, M. (1996)

2.1.3 Hoch- und Niedertemperaturanwendungen

Hochtemperaturanlagen arbeiten im Temperaturbereich von 280°C bis 350°C und sind, da andere Katalysatormaterialien verwendet werden, welche chemisch mit SO₂ nicht so leicht reagieren, SO₂-Verunreinigungen gegenüber wenig empfindlich. Zusätzlich können laut Thomé-Kozmiensky K.J. (1994) ähnlich aufgebaute Oxidationskatalysatoren direkt zur Zerstörung von Dioxinen, Furanen und anderer organischer Kohlenwasserstoffe nachgeschaltet werden.

Die **Niedertemperaturkatalysatoren** arbeiten im Temperaturbereich von 165°C bis 220°C und sind sehr empfindlich gegenüber SO₂-Verunreinigungen im Abgas. Dies begründet die Schaltung nach der Abgasfeinreinigung. Der gleichzeitige Einsatz als Oxidationskatalysator zur Zerstörung der Dioxine und Furane ist nicht möglich. Vorteilhaft ist jedoch, dass die Erwärmung des Abgases auf Arbeitstemperatur des Katalysators regenerativ erfolgen kann, d.h. es wird die Wärme des entstaubten Abgases vor dem Wäscher über einen Luft-Luft-Wärmetauscher genutzt.

2.2 Ammoniakaufgabe

Die Ammoniakaufgabe stellt neben den Katalysatoren eine der wichtigsten Anlagenteile dar. Ammoniak kann als Ammoniak-Wasser-Gemisch oder als Ammoniak-Luft-Gemisch eingebracht werden.

Um keine Schief lagen im NH₃/NO_x-Molverhältnis zu erzeugen, bzw. auf schon vorhandene Schief lagen zu reagieren, werden Eindüsungsraster und Regelventile zur Vertrimmung benutzt.

In der Restmüllverbrennungsanlage Lauta wird die Ammoniakeindüsung mit Hilfe des Mitsubishi-Systems durchgeführt. Hierbei befinden sich die NH₃-Inlets lückenversetzt im 45°-Winkel auf den unteren zwei Seiten quer zur Strömungsrichtung liegender Rohre.

2.3 Katalysatorwerkstoffe und -formen

Der Katalysatorwerkstoff richtet sich hauptsächlich nach der Einsatztemperatur, wie

Abbildung 2.3 zeigt. Katalysatoren für den Hochtemperaturbereich (Temperaturen größer 400°C) sind Keramikmonolithe mit hohem Titanoxidanteil.

Bei Entstickungstemperaturen zwischen 300°C und 400°C muss die Aktivität des Katalysators durch die Zugabe von Vanadiumoxid gesteigert werden.

Die Katalyse weit unterhalb von 300°C kann nur durch Edelmetallkatalysatoren erfolgen, bei denen Platin, Rhodium oder Palladium auf einen Keramikgrundkörper aufgebracht werden.



Durch eine Vielzahl von Mischungsverhältnissen zwischen diesen Komponenten oder durch die Zugabe von weiteren Additiven (Vanadium, Molybdän, Wolfram, Eisen, Chrom, Kupfer, Kobalt) können jedoch auch sämtliche dazwischenliegenden Temperaturbereiche optimal abgedeckt werden.

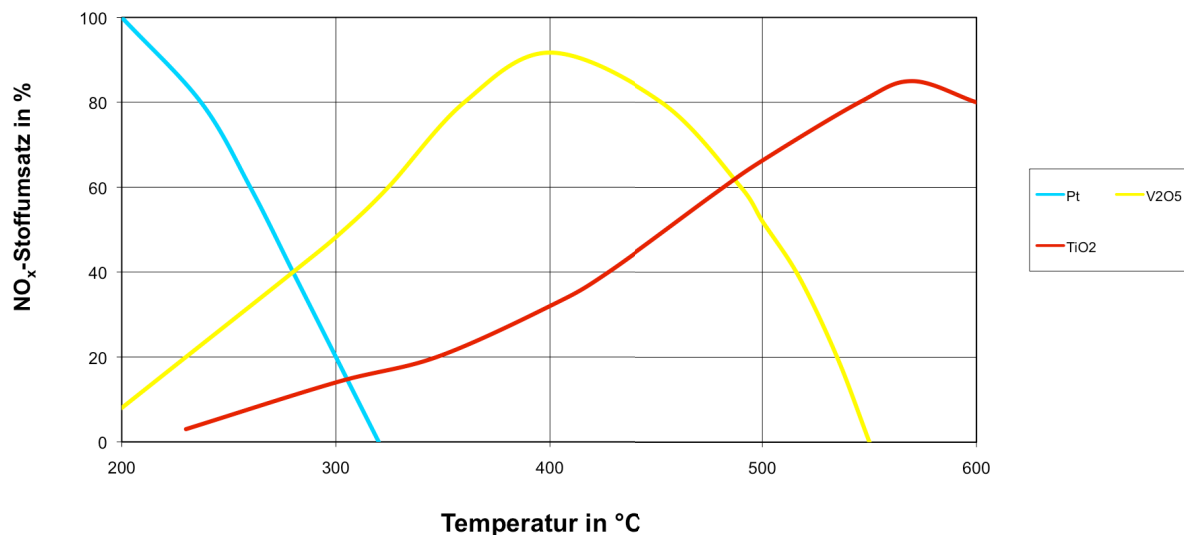


Abbildung 2.3: NO_x-Stoffumsatz in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Katalysatorwerkstoffe nach Schultes, M. (1996)

Neben einer großen inneren Oberfläche die im Allgemeinen durch die Porosität des Trägermaterials gegeben ist, ist ein gut gaszugängliches äußeres Strömungskanalssystem erforderlich, das durch Anordnung der Katalysatoren in Schüttschichten, Waben- (meist mit rechteckigem oder mit sechseckigem Strömungsquerschnitt) oder Plattenform zur Verfügung gestellt wird. Für großtechnische Anwendungen kommen überwiegend Waben mit Rechteckquerschnitt (vgl. Abbildung 2.4) zum Einsatz, da sie einen geringen Druckverlust verursachen und eine hohe spezifische Oberfläche besitzen.

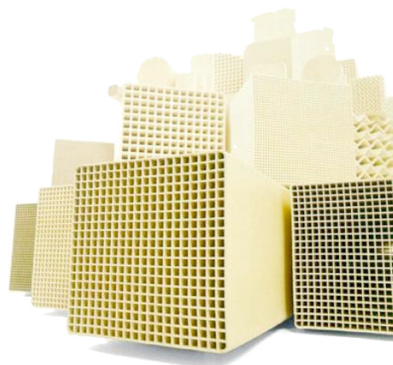


Abbildung 2.4: Katalysator in Wabenform mit Rechteckquerschnitt (DENOX Katalysatoren, CERAM Porzellanfabrik Frauenthal GmbH)

Am Kanaleintritt liegt der größte radiale Stofftransport vor und mit zunehmender Lauflänge nähert sich der Umsatz einem konstanten Wert asymptotisch. Die Ursache hierfür liegt in der Tatsache, dass die Strömung laminar wird, wodurch sich der Diffusionswiderstand in der diffusen Grenzschicht am Katalysator vergrößert (Stefan-Diffusion).

Für die praktische Anwendung haben sich daher Katalysatorlängen von 0,8 bis 1 m Länge bewährt, wobei meist drei oder mehr Höhenlagen zur weitestgehenden Entstickung notwendig sind (vgl. Abbildung 2.5).

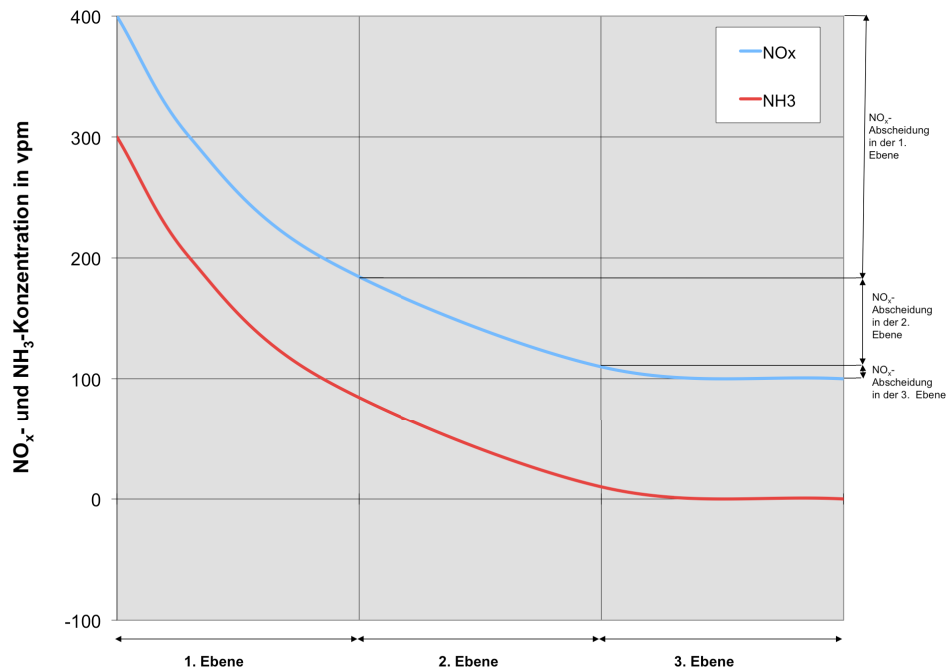


Abbildung 2.5: NO_x- und NH₃-Konzentrationsverlauf in vpm entlang mehrerer Katalysatorlagen nach Schultes, M. (1996)

2.4 Reaktionsmechanismen

Beim SCR-Verfahren werden die Stickoxide zum Beispiel unter Zugabe von Ammoniakwasser an einem Katalysator zu Stickstoff und Wasserdampf umgesetzt.

Chemische Reaktionen bei der selektiven katalytischen Reduktion (SCR):

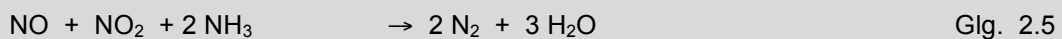
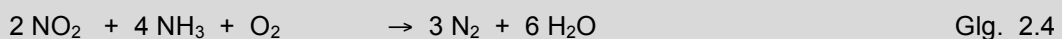
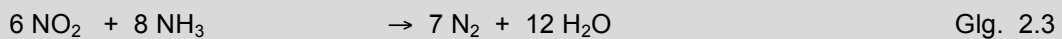
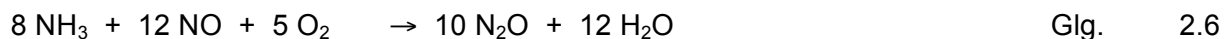


Abbildung 2.6: Reaktionsgleichungen bei der SCR nach Majewski (2002)

Die verschiedenen chemischen Reaktionen, die bei der selektiven katalytischen Reduktion von Ammoniak auftreten werden durch die oben angeführten Gleichungen (Glg. 2.1 bis Glg. 2.5) zusammengefasst.

Gleichung 2.2 ist die dominante Bruttoreaktion und wird im Allgemeinen zur Berechnung der Umsetzungsrate herangezogen.

Andere Reaktionen, wie zum Beispiel die Oxidation von NH_3 mit dem vorhandenen O_2 zu NO , NO_2 , N_2O und N_2 können mit Hilfe der summativen Gleichung 2.6 beschrieben werden:



Zur Beschreibung der Reduktionsmechanismen an Keramikatalysatoren in großen verfahrenstechnischen Anlagen, wie z.B. Müllverbrennungsanlagen oder Kraftwerke, mit den aktiven Komponenten Vanadium, Molybdän, Wolfram, Chrom etc. wird der **Eley-Rideal-Mechanismus** herangezogen. Es handelt sich hierbei um eine Reaktion

pseudoerster Ordnung in Bezug auf NO, wobei NH₃ an sauren Zentren chemisorbiert, und die Reaktionspartner aus der Gasphase reagieren.

Der **Langmuir-Hinshelwood-Mechanismus** wird laut Görner et al. (2002) zur Beschreibung von Abbauprozessen an Keramikatalysatoren mit der aktiven Komponente Platin oder zur Beschreibung von Abbauprozessen durch Aktivkohlen und Koks verwendet. Alle Reaktionsteilnehmer chemisorbieren und reagieren in der Adsorptionsschicht. NO_x kann bei Abwesenheit anderer Reduktionsmittel direkt an Kohlenstoff reduziert werden (vgl. Abbildung 2.7).

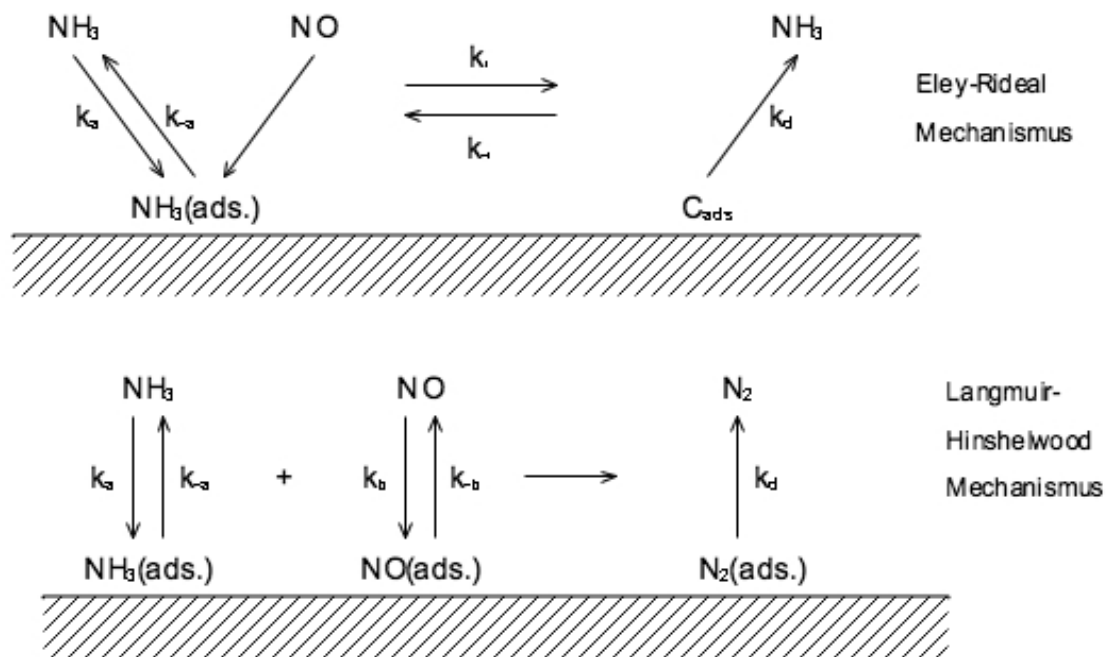


Abbildung 2.7: Mechanismen zur Beschreibung der Reaktoroperation nach Prins et al. (1993)

Der in Abbildung 2.8 gezeigte Eley-Rideal-Reaktionsmechanismus an einem Keramikatalysator mit Vanadiumpentoxid als aktive Komponente, kann laut Prins et al. (1993) wie folgt in Unterschritte gegliedert werden:

- Massentransfer vom Gasstrom zur Katalysatoroberfläche
- Diffusion zum porösen Katalysatormaterial von der Katalysator-Oberfläche
- Adsorption an der Innenoberfläche der Poren
- Desorption der Produkte von der Innenoberfläche der Poren
- Diffusion der Produkte durch die Poren zur Oberfläche des Katalysatormaterials
- Massentransfer der Produkte von der Katalysatoroberfläche zum Gasstrom

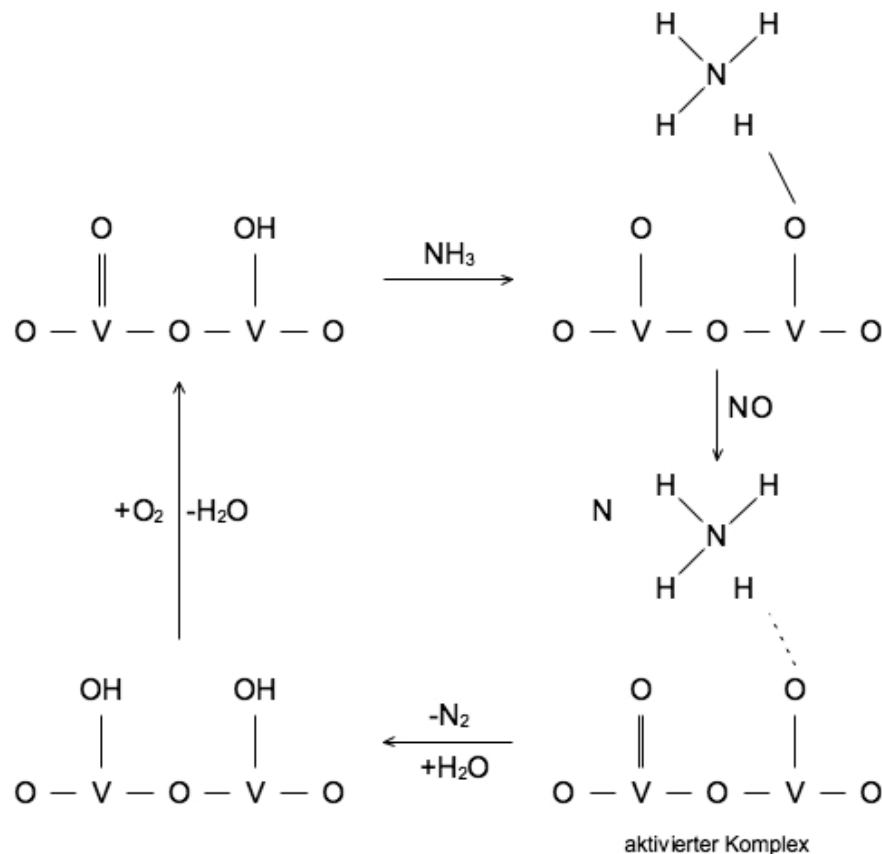


Abbildung 2.8: Schema einer Reaktion am Katalysator nach Prins et al. (1993)

Wichtige Nebenreaktionen (Glg. 2.7 bis 2.9), welche eine Deaktivierung des Katalysators bewirken, können mittels Einhalten spezieller Temperaturfenster, eines speziellen Reaktordesigns und einer speziellen Katalysatorzusammenstellung minimiert bzw. verhindert werden.



2.4.1 NO_x -Abbaumechanismus nach Tronconi

Bezugnehmend auf Tronconi et al. (1992) ergibt sich für den Eley-Rideal-Mechanismus die in Gleichung 2.10 beschriebene Reaktionsrate für NO mit der Reaktionsstöchiometrie $4 NO + 4 NH_3 + O_2 \rightarrow 4 N_2 + 6 H_2O$ (Glg. 2.2). Die Gleichungen 2.10 und 2.11 werden zur Katalysatorsimulation in der vorliegenden Arbeit herangezogen.

Reaktionsrate für NO:

$$R_{\text{NO}} = k_c C_{\text{NO}} \frac{K_{\text{NH}_3} C_{\text{NH}_3}}{1 + K_{\text{NH}_3} C_{\text{NH}_3}} \quad \text{Glg. 2.10}$$

$$\text{mit } k_c = 1,28 \times 10^{-11} e^{(-22400/RT)} \quad \text{Glg. 2.11}$$

$$K_{\text{NH}_3} = \text{const.}$$

Abbildung 2.9: Reaktionsrate für NO nach Tronconi et al. (1992)

Die eindimensionalen Erhaltungsgleichungen (vgl. Glg. 2.12 und 2.13) für die Reaktanden NO und NH₃ in der Gasphase (äußeres Feld) werden unter folgenden Annahmen beschrieben:

- identische isotherme Bedingungen in jedem Kanal
- konstante Fluideigenschaften
- vernachlässigbare axiale Diffusion
- Reaktionsstöchiometrie: $4 \text{ NO} + 4 \text{ NH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow 4 \text{ N}_2 + 6 \text{ H}_2\text{O}$ gemäß Glg. 2.2

Der dimensionslose Massentransferkoeffizient (Sherwood-Zahl, vgl. Glg. 2.14) wurde in Analogie mit dem Graetz-Problem laut Shah et al. (1978) mit konstanter Wandtemperatur und einem sich laminar entwickelndem Geschwindigkeitsprofil beschrieben, wobei $Sc = 0,7$ angenommen wurde.

Gleichungen 2.12 bis 2.15 erlauben eine Simulation eines einzelnen Kanals in SCR-Katalysatoren mit vollständiger Darstellung des Einflusses der Diffusion von NO und NH₃ auch im Fall eines substöchiometrischen NH₃/NO-Aufgabeverhältnisses, wie es im industriellen Einsatz vorkommt.

Dimensionlose Gleichungen des NO-Transports in den Kanälen und in des Poren des SCR-Monolith-Reaktors:

Äußeres Feld:

$$\frac{dC_{\text{NO},b}^*}{dZ^*} = -4 \text{ Sh}_{\text{NO}} (C_{\text{NO},b}^* - C_{\text{NO}}^*) \quad \text{mit } Z^* = 0, C_{\text{NO},b}^* = 1 \quad \text{Glg. 2.12}$$

$$\alpha - C_{\text{NH}_3,b}^* = 1 - C_{\text{NO},b}^* \quad \text{Glg. 2.13}$$

Massentransferkoeffizient (gasförmig-fest):

$$\text{Sh}_{\text{NO}} = 2,977 + 8,827 (1000 Z^*)^{0,545} e^{-48,2 Z^*} \quad \text{Glg. 2.14}$$

Inneres Feld:

$$\text{Sh}_{\text{NO}} (C_{\text{NO},b}^* - C_{\text{NO}}^*) = \text{Da}_m \left[C_{\text{NO}}^{*2} - Y_0^2 + 2(S_1 - S_2) \left(C_{\text{NO}}^* - Y_0 - S_2 \ln \frac{C_{\text{NO}}^* + S_2}{Y_0 + S_2} \right) \right] \quad \text{Glg. 2.15}$$

mit: $S_1 = \frac{D_{e,\text{NH}_3}}{D_{e,\text{NO}}} C_{\text{NH}_3}^* - C_{\text{NO}}^*$; $S_2 = S_1 + \frac{D_{e,\text{NH}_3}}{D_{e,\text{NO}}} \frac{1}{K_{\text{NH}_3}}$

$$Y_0 = 0 \quad \text{wenn} \quad S_1 \geq 0$$

$$Y_0 = -S_1 \quad \text{wenn} \quad S_1 < 0$$

Abbildung 2.10: Dimensionslose Species-Transport-Gleichungen des SCR-Monolith-Reaktors nach Tronconi et al. (1992)

3 Numerische Strömungsmechanik - CFD

3.1 Grundlagen der Numerischen Strömungsmechanik

Die Numerische Strömungsmechanik CFD (Computational Fluid Dynamics) ist eine Wissenschaft zur Berechnung von Strömungen, Wärme- und Stoffübergängen, chemischen Reaktionen und anderen verwandten Phänomenen durch das numerische Lösen von mathematischen Beziehungen, mit denen oben genannte Prozesse beschrieben werden (Martens, 2000). Mit Hilfe von CFD können Apparateauslegungsfehler, wie falsche konstruktive Gestaltung oder falsche Wahl der Betriebsparameter, entdeckt werden.

3.1.1 Vorteile der numerischen Strömungsmechanik

Als Vorteile von CFD gegenüber experimentellen Versuchen ergeben sich schnelle Durchführzeiten der Untersuchungen und eine frühe Einbindung der Ergebnisse in die Anlagenentwicklung wird dadurch möglich. Im Fall der SCR-Anlage Lauta konnte das Problem der NH_3 -Eindüsung, es ergaben sich immer wieder Schiefklagen im NO_x/NH_3 -Verhältnis, durch mehrere Simulationen mit unterschiedlicher Einströmungsgeschwindigkeit und optimierter Art der NH_3 -Aufgabe, verbessert werden (vgl. Kapitel 7.2.2).

Als weiterer positiver Aspekt von CFD sollten die, im Vergleich zu experimentellen Untersuchungen, niedrigen Kosten angeführt werden. Simulationen sind unter realen Bedingungen möglich, da theoretisch alle physikalischen Bedingungen numerisch nachempfunden werden können.

Weiters besteht die Möglichkeit unter idealen Bedingungen zu simulieren, da physikalische Zustände genau kontrolliert werden können, und eine isolierte Betrachtung spezifischer Phänomene durchführbar ist. Daraus ergeben sich umfassende Informationen zur Auswertung von Strömungsparametern an allen beliebigen Punkten der Anlage, welche experimentell nicht oder nur sehr aufwendig zugänglich sind, Detektion der Fehlerquellen und –mechanismen und die Möglichkeit einer Verbesserung bestehender Designs.

3.1.2 Anwendungsgebiete

Sinnvoll einsetzbar für Prozessanalysen ist CFD, wenn Abläufe in Apparaten detailliert untersucht werden sollen, und eine Koppelung von chemischen Prozessen bzw. Stofftransport mit nicht idealer Strömung stattfinden soll. Es können ausführliche Informationen über Komponenten gewonnen werden, oder experimentell nicht zugänglich Konfigurationen untersucht werden. Auch wird CFD bei der Untersuchung von kritischen Zuständen und beim Vergleich von verschiedenen Komponentenentwürfen geeignete Ergebnisse liefern.



3.1.3 Ablauf einer CFD-Untersuchung

3.1.3.1 Definition der Simulationsziele

Vor Beginn einer CFD-Analyse muss die Verwendung und Anwendung der Resultate genau definiert werden. Der benötigte Grad der Genauigkeit der Ergebnisse und die Schnelligkeit, in der die Ergebnisse benötigt werden, sollte ebenfalls festgesetzt werden. Auch sollte die Durchführbarkeit der Aufgabe mit Standardfunktionen nachgeprüft werden.

3.1.3.2 Einschränkung des Untersuchungsbereich

Für die Durchführung der Simulation müssen der zu untersuchende Bereich und seine Grenzen exakt festgelegt werden. Es muss überprüft werden, ob Teile des Gesamtsystems getrennt betrachtet werden können. Eine klare Definition der Randbedingungen an den zu wählenden Grenzen ist vorzunehmen.

3.1.3.3 Entwurf und Erstellung des Gitters

Laut Oertel (1995) bezeichnet man die Gesamtheit der Diskretisierungsstellen eines numerischen Verfahrens als numerisches Netz oder Gitter. Zum Zweck der graphischen Darstellung werden die Stellen (Punkte) miteinander verbunden. Die Netzpunkte sind im Allgemeinen nicht mit den Punkten zur Geometriedefinition identisch. Für den Entwurf eines optimalen Netzgitters sollten der optimale Gittertyp, der Grad der Auflösung, die ungefähre Zellenzahl und die vorhandenen Computerressourcen zur Berechnung des Gitters berücksichtigt werden. Um ein möglichst gleichförmiges Strömungsprofil zu erhalten, empfiehlt es sich zur eigentlichen Geometrie am Ein- und Austritt des Strömungsmediums zusätzliche Bereiche als Vorlauf- bzw. Nachlaufstrecke anzufügen.

3.1.3.4 Aufsetzen eines numerischen Modells

Um laut Martens (2000) ein numerischen Modell erfolgreich aufsetzen zu können müssen als erstes die passenden physikalischen Modelle ausgewählt werden. Weiters sollen Definitionen der Materialeigenschaften (fest, flüssig, gasförmig), der Arbeitsbedingungen und der Randbedingungen auf allen Randflächen erfolgen. Für eine erfolgreiche Durchführung der Lösung sind auch die Vorgabe einer Startlösung und das Setzen von Lösungsparametern und Konvergenzmonitoren (Residuen und Oberflächenwerte) von Bedeutung.

3.1.3.5 Berechnung der Lösung

Die Berechnung der Lösung der diskretisierten Erhaltungsgleichungen erfolgt iterativ. Die Konvergenz ist dann erreicht, wenn Veränderungen von einer Iteration zur nächsten vernachlässigbar sind, wobei Residuen eine Möglichkeit bieten dies zu beurteilen. Die



Genauigkeit der gefundenen Lösung hängt von den physikalischen Modellen, der Gitterauflösung und vom korrekten Setup des verwendeten Modells ab. Es ist zu beachten, dass nur eine vom Gitter unabhängige, konvergierte Lösung nützliche Resultate liefert.

3.1.4 Limitationen der Methode

Da CFD auf physikalischen Modellen realer Prozesse basiert, hängt die Genauigkeit der gefundenen Ergebnisse von der Genauigkeit der verwendeten Modelle und der Randbedingungen ab. Numerisches Lösen von Gleichungen impliziert Fehler, wie Rundungsfehler, Modellfehler durch vereinfachte Annahmen in den Modellen und Diskretisierungsfehler durch zu grobe Gitterstrukturen.

3.2 Grundgleichungen der numerischen Strömungsmechanik

In der numerischen Strömungsmechanik wird mit Volumenelementen als Bilanzgebiet gerechnet. Nach Festlegen der Bilanzgrößen (extensive Größen) werden differentielle Bilanzgleichungen (Transportgleichungen) gewählt, um Vorgänge, wie Temperatur- oder Konzentrationsverläufe, innerhalb eines Apparates darstellen zu können. In Abbildung 3.1 wird ein Volumenelement mit einem ein- und austretenden Strom gezeigt. Innerhalb des Volumenelementes kann es zu einer Speicherung (bzw. Freisetzung) der Transportgrößen oder einer Umwandlung (chemische Reaktion) kommen. Die allgemeine Bilanzgleichung lautet nach somit:

$$\text{Zufuhr} - \text{Abfuhr} = \pm \text{Umwandlung} \pm \text{Speicherung}$$

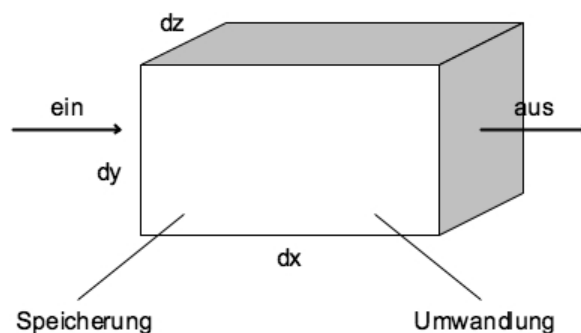


Abbildung 3.1: Bilanzelement

3.3 Transportgleichungen

3.3.1 Allgemeine Transportgleichung

Als Ausgangspunkt zur mathematischen Erfassung einer Strömung dient ein Kontrollvolumen, das sich raumfest in der Strömung befindet. Für die Bilanzierung einer Strömungsgröße kann laut Noll (1993) folgende allgemeine Form der Bilanzgleichung in Tensornotation aufgestellt werden, wobei hier üblicherweise die Einstein'sche Summationskonvention verwendet wird, bei der x_j die kartesischen Richtungen und u_j den Anteil der entsprechenden Geschwindigkeitskomponenten wiedergeben:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(u_j\phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x_j} \right) + S_\phi \quad \text{Glg. 3.1}$$

Lokale zeitliche Änderung + Konvektion = Diffusion + Quellterme

Wobei ϕ die jeweils gesucht Strömungs- bzw. Feldgröße und Γ der dazugehörige Diffusionskoeffizient ist. Je nach Transportvorgang können ϕ und Γ folgende Werte annehmen:

Tabelle 3.1: Werte für ϕ und Γ bei verschiedenen Transportvorgängen

| Transportvorgang | ϕ | Γ |
|-------------------------------|---------------|------------------------------------|
| Masse | 1 | - |
| Impuls | v | μ_T |
| turbulente kinetische Energie | k | $\frac{\mu_T}{\sigma_k}$ |
| Dissipation | ε | $\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon}$ |
| Enthalpie | h | $\frac{\mu_T}{Pr}$ |
| Speziestransport | m_i | $\frac{\mu_T}{Sc}$ |

3.3.2 Massenbilanz

Die Massenbilanz an einem ortsfesten Kontrollvolumen ergibt für die zeitliche Änderung der im Kontrollvolumen enthaltenen Masse, wobei ρ die Dichte, u_j die Geschwindigkeit in Richtung j durch die differentielle Fläche dA im Kontrollvolumen der Größe dV bezeichnet:



$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \cdot dA \cdot dx_j = \rho u_j \cdot dA - \left(\rho u_j + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} \cdot dx_j \right) \cdot dA \quad \text{Glg. 3.2}$$

Auf der linken Seite der Gleichung wird der Massenfluss pro Zeit, auf der rechten Seite der Massenfluss über die Grenzflächen wiedergegeben.

Wird die Gleichung in die kartesische Form (vgl. Glg. 3.3) gebracht gibt j die Richtung des Koordinatensystems wieder.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad \text{Glg. 3.3}$$

3.3.3 Impulsbilanz

Zur Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes einer Strömung können Impulsgleichungen verwendet werden. In Übereinstimmung mit den Navier-Stokes-Gleichungen ergibt sich für die Richtung i Gleichung 3.4

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij}) \quad \text{Glg. 3.4}$$

mit g_i als Gravitationskraft, p als statischer Druck und τ_{ij} als viskoser Anteil des Spannungstensors für ein Newtonsches Fluid. Der Tensor τ_{ij} kann verkürzt mit μ als die dynamische Viskosität und δ_{ij} als das Kronecker-Delta ($\delta_{ij} = 1$ wenn $i=j$, sonst $\delta_{ij} = 0$) wiedergegeben werden.

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad \text{Glg. 3.5}$$

3.3.4 Energiebilanz

Aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik, angewandt auf ein Kontrollvolumen als Bilanzraum, folgt die Gleichung 3.6 für Enthalpieerhaltung mit S_h als Quelle oder Senke der Enthalpie.

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j h)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{\sigma_{Pr}} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + S_h \quad \text{Glg. 3.6}$$

Die dimensionslose Prandtl-Zahl wird über die Wärmeleitung λ , wie folgt, definiert.



$$\sigma_{Pr} = \frac{\mu \cdot c_p}{\lambda} \quad \text{Glg. 3.7}$$

Temperatur T und Enthalpie h sind durch folgende Beziehung miteinander verbunden, wobei c_p eine Funktion der Temperatur ist.

$$h = \sum_j \frac{u_j^2}{2} + c_p(T) \cdot T \quad \text{Glg. 3.8}$$

3.3.5 Speziestransport

Da normalerweise mehrere chemische Spezies in der Strömung enthalten sind, muss für jede vorkommende Spezies eine Transportgleichung aufgestellt werden. Aufgrund der ablaufenden Reaktionen ändern sich die Massen der einzelnen Spezies. Die Summe der Massen aller Spezies innerhalb des Kontrollvolumens muss allerdings im Fall der inkompressiblen Strömung konstant bleiben, weshalb der Massenbruch m_i eingeführt wird (Ferziger et al., 2002).

$$m_i = \frac{\rho_i}{\sum_{k=1}^{N_s} \rho_k} \quad \text{Glg. 3.9}$$

ρ_i ist hier die Dichte der aktuellen Spezies und N_s die Summe aller vorkommenden Spezies.

Daraus ergibt sich die Transportgleichung 3.10 mit der Schmidt-Zahl $Sc = \frac{\mu}{\rho \Gamma_i}$, wobei Γ_i der

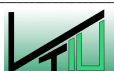
Diffusionskoeffizient der Spezies i ist. Die Größe S_i geht durch Reaktion der Komponente i bzw. durch Absorption oder Desorption im Kontrollvolumen in die Gleichung ein.

$$\frac{\partial(\rho m_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j m_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{Sc} \cdot \frac{\partial m_i}{\partial x_j} \right] + S_i \quad \text{Glg. 3.10}$$

3.3.6 Zustandsgleichung für ideale Gase

Zum Schließen des Systems der partiellen Differentialgleichungen ist eine Zustandsgleichung, hier die Zustandsgleichung für ideale Gase notwendig. Mit gegebenen Druck und gegebener Konzentration kann über Gleichung 3.11 die Fluidichte bestimmt werden, wobei m_i der Massenbruch und M_i das Molekulargewicht der Spezies ist.

$$\frac{p}{\rho} = RT \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{M_i} \quad \text{Glg. 3.11}$$



3.3.7 Turbulenzmodellierung

Die meisten technisch bedeutenden Strömungen sind turbulent bzw. weisen einen verwirbelten Charakter auf. Ein notwendiges, aber nicht hinreichendes, Indiz für das Vorhandensein von Turbulenz in der Strömung ist laut Weiß (1995) die Überlagerung der Hauptströmungsgeschwindigkeit durch eine unregelmäßige Schwankungsbewegung. Das bewirkt einen merklichen Impulstransport quer zur Hauptströmungsrichtung und eine starke Vermischung des Fluids im Apparat. Das Ausmaß der Mischwirkungen lässt das Fluid in einem Zustand mit um Größenordnungen erhöhter Zähigkeit erscheinen. Bei turbulenten Strömungen ist die Mischbewegung für den Energiehaushalt von großer Bedeutung, da ständig Energie der Hauptströmung in die großen Turbulenzelemente abfließt. Die Dissipation der Energie geschieht hingegen vorwiegend in den kleinsten Turbulenzelementen.

Eine Strömung ist laut Martens (2000) dann als turbulent anzusehen, wenn die Reynoldszahl

$$\text{Re}_L = \frac{\rho UL}{\mu} \quad \text{Glg. 3.12}$$

mit $L = x, D, D_h, \text{ etc.}$

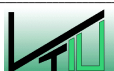
- bei Umströmung: $\text{Re}_x \geq 5 \times 10^5$ entlang einer Oberfläche
 $\text{Re}_D \geq 20.000$ über ein Hindernis
- bei Durchströmung: $\text{Re}_{Dh} \geq 2.300$

ist. Wobei beachtet werden muss, dass Faktoren wie die Oberflächenbeschaffenheit einen früheren Umschlag von laminarer zu turbulenter Strömung bewirken können.

Ein turbulenter Vorgang kann im Prinzip direkt durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben werden. Hierbei spricht man von der direkten numerischen Simulation (DNS). Die Turbulenzstrukturen werden direkt aus den Erhaltungsgleichungen berechnet, woraus sich für turbulente Strömungen wegen der notwendigen hohen Auflösung der Berechnungsgebietes bei der räumlichen Diskretisierung ein gewaltiger numerischer Aufwand ergibt. Deshalb werden Navier-Stokes-Gleichungen nur für laminare Strömungen eingesetzt.

Einen weiteren Lösungsansatz liefert die Large Eddy Simulation (LES), bei der großskalige Turbulenzwirbel direkt berechnet und feinere durch Modelle beschrieben werden.

Die meistverbreitete Methode ist die Beschreibung turbulenter Vorgänge mit Hilfe von Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (RANS) Gleichungen. Sie ergeben sich laut Ferziger et al. (2002) aus einer zeitlichen Mittelung über die instationären turbulenten Schwankungsbewegungen aus den Navier-Stokes-Gleichungen, wobei eine



schwankungsunabhängige Strömungsgröße ϕ in einen zeitlichen Mittelwert $\bar{\phi}$ und einen Schwankungsanteil ϕ' geteilt wird. Man spricht dabei von der Reynold'schen Mittelung.

$$\phi(x_i, t) = \bar{\phi}(x_i) + \phi'(x_i, t) \quad \text{mit} \quad \bar{\phi}(x_i) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi(x_i, t) dt \quad \text{Glg. 3.13}$$

Eine weitere Möglichkeit für turbulente Strömungen eröffnet die massengewichtete Mittelung nach Favre (Glg. 3.14), wobei der Mittelwert $\tilde{\phi}$ und der Schwankungsanteil ϕ'' eingeführt werden.

$$\phi(x_i, t) = \tilde{\phi}(x_i) + \phi''(x_i, t) \quad \text{mit} \quad \tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad \text{Glg. 3.14}$$

Durch Einsetzen einer der oben angeführten Gleichungen (Glg. 3.13 und 3.14) für die Variable ϕ der allgemeinen Transportgleichung (Glg. 3.1) und Vereinfachung entstehen zusätzliche Terme für die turbulenten Schwankungsgrößen in Form von $\overline{\rho u_i' u_j'}$, die auch Reynoldsspannungen genannt werden. Ausgehend von dieser Erweiterung ist das zeitlich gemittelte System nicht mehr geschlossen, weshalb mittels Turbulenzmodellierung zusätzliche Beziehungen zur Bestimmung der Reynoldsspannungen herangezogen werden müssen. Eine günstige Methode zur Erfassung der Reynold'schen Spannungen liefert die Boussinesq-Hypothese, bei der letztlich die molekulare Viskosität μ durch die turbulente Viskosität μ_T (Wirbelviskosität), die den diffusen Impulstransport beschreibt, ersetzt wird. Terme, die Produkte aus Schwankungsgrößen enthalten, werden als proportional zu den Gradienten der Hauptströmung beschrieben:

$$-\overline{\rho u_i' u_j'} = \mu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho \delta_{ij} k \quad \text{mit} \quad k = \frac{\overline{u_i' u_j'}}{2} \quad \text{Glg. 3.15}$$

Die neu eingeführte turbulente Viskosität μ_T muss modelliert werden. Prinzipiell kommen dafür algebraische Modelle, Eingleichungsmodelle und Zweigleichungsmodelle in Frage. Alternativ dafür gibt es noch die Reynoldsspannungsmodelle, wobei die einzelnen Terme hier direkt beschrieben werden. Eine Auswahl zeigt Abbildung 3.2.

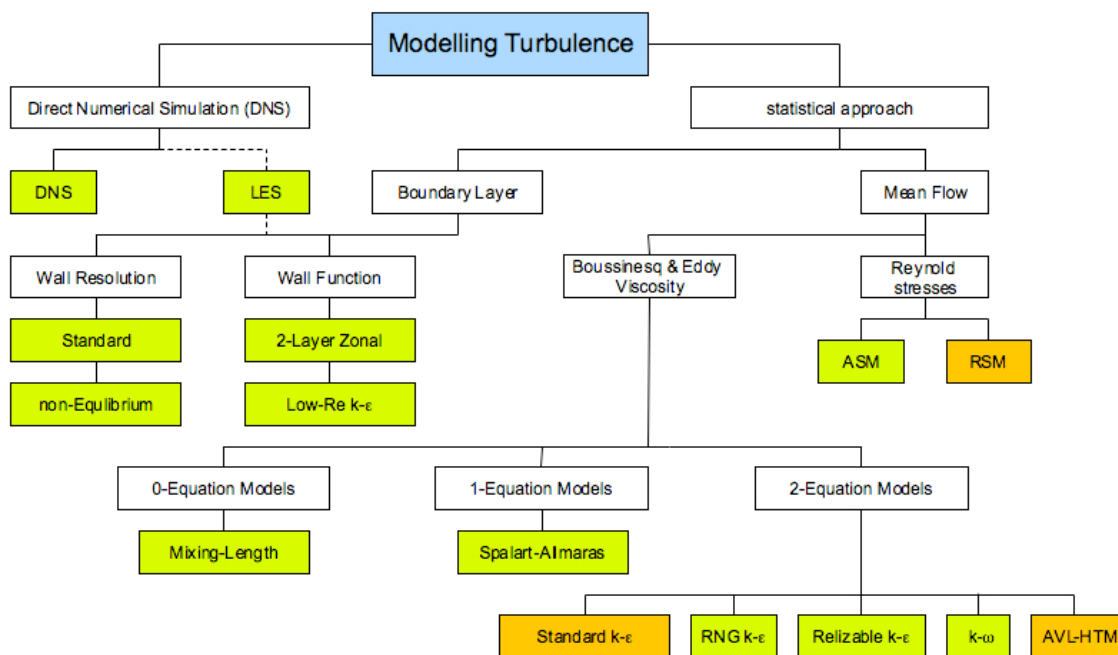


Abbildung 3.2: Systematisierung der Turbulenzmodelle nach Martens (2000)

Bei den CFD-Berechnungen, die für die vorliegende Arbeit durchgeführt wurden, wurde mit folgenden Modellen gerechnet:

3.3.7.1 k-ε Model

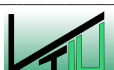
Das k-ε Model ist das am meisten benutzte Turbulenzmodell für industrielle Berechnungen und ist Teil der meisten CFD-Codes. Es gehört zu den Zweigleichungsmodellen, besitzt somit zwei zusätzliche Differentialgleichungen, eine für die turbulente kinetische Energie k und eine für die Dissipationsrate ε . Es ist numerisch stabil und wurde für viele Bereiche, einschließlich Wärmeübergang, Verbrennung, Zwei-Phasen-Strömung, getestet. Besonders für eine schnelle einleitende Schätzung des Flussfeldes oder in Situationen in denen andere Phänomene, wie chemische Reaktionen, Verbrennung etc. von größerer Bedeutung sind, ist es zu empfehlen.

Zur Viskosität μ wird eine effektive Viskosität μ_{eff} ersetzt, welche sich aus einem turbulenten und einem laminaren Anteil zusammensetzt.

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_l + \mu_t$$

Glg. 3.16

Durch die Einführung einer Differentialgleichung für die Dissipation ε entsteht mit der turbulenten kinetischen Energie k und der turbulenten Längeneinheit L folgende Beziehung.



$$\varepsilon = C_{\mu}^{3/4} \frac{k^{3/2}}{L} \quad \text{Glg. 3.17}$$

$$k = \frac{\overline{u_i u_j'}}{2} \quad \text{mit } u_1' = u_2' = u_3' \quad \text{Glg. 3.18}$$

Mit Hilfe der Prandtl-Kolmogorov-Beziehung kann somit die Wirbelviskosität bestimmt werden.

$$\mu_t = C_{\mu} \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad \text{Glg. 3.19}$$

Gleichung 3.18 verdeutlicht, dass das k - ε Modell vereinfachend von der Vorstellung einer isotropen Turbulenz ausgeht. Für die Größen k und ε müssen die zwei zusätzlich eingeführten Transportgleichungen gelöst werden, wobei σ_k und σ_ε die effektiven Prandtlzahlen für k bzw. ε , P der Produktionsterm der Gleichung für k und $\varepsilon \rho$ den Dissipationsterm bezeichnet.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_T}{\sigma_k} \cdot \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + (P - \varepsilon) \rho \quad \text{Glg. 3.20}$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + (C_{\varepsilon 1} P - C_{\varepsilon 2} \varepsilon) \frac{\varepsilon}{k} \rho \quad \text{Glg. 3.21}$$

Die üblichen, experimentell ermittelten Werte der Konstanten können aus untenstehender Tabelle entnommen werden.

Tabelle 3.2: Experimentell ermittelte Werte für Erhaltungsgleichungen nach Frank (2000)

| C_μ | $C_{\varepsilon 1}$ | $C_{\varepsilon 2}$ | σ_k | σ_ε | Pr | Sc | Pr_t | Sc_t |
|---------|---------------------|---------------------|------------|----------------------|---------------------------|----------------------|--------|--------|
| 0,09 | 1,44 | 1,92 | 1,0 | 1,3 | $\frac{\mu C_p}{\lambda}$ | $\frac{\mu}{\rho D}$ | 0,6 | 0,85 |

3.3.7.2 Reynolds Stress Model (RSM)

Beim Reynolds Stress Model (RSM) wird im dreidimensionalen Fall für die sechs unterschiedlichen Komponenten des symmetrischen Reynold'schen Spannungstensors



jeweils eine Gleichung gelöst. Dazu werden außerdem Werte der Dissipation - der turbulenten kinetischen Energie k benötigt, so dass insgesamt sieben neue Transportgleichungen zu bearbeiten sind. Es treten jedoch Tripelkorrelationen der turbulenten Schwankungsgrößen auf, die wiederum modelliert werden müssen.

Die exakte Reynolds Stress Gleichung kann laut FLUENT (2001) wie folgt beschrieben werden:

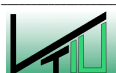
$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{u_i u_j})}_{\text{lokale Zeitableitung}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}(\rho U_k \overline{u_i u_j})}_{C_{ij} = \text{Konvektion}} = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\rho \overline{u_i u_j u_k} + \rho (\delta_{kj} \overline{u_i} + \delta_{ik} \overline{u_j}) \right]}_{D_{ij}^T = \text{turbulente Diffusion}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u_i u_j} \right]}_{D_{ij}^L = \text{molekulare Diffusion}} \\
 & - \underbrace{\rho \left(\overline{u_i u_k} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} + \overline{u_j u_k} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right)}_{P_{ij} = \text{Druckproduktion}} - \underbrace{\rho \beta \left(\overline{g_i u_j \theta} + \overline{g_j u_i \theta} \right)}_{G_{ij} = \text{Auftriebsproduktion}} + \underbrace{\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)}_{\phi_{ij} = \text{Druckbelastung}} \\
 & - \underbrace{2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k}}_{\varepsilon_{ij} = \text{Dissipation}} - \underbrace{2\rho \Omega_k \left(\overline{u_i u_m \varepsilon_{ikm}} + \overline{u_i u_m \varepsilon_{jkm}} \right)}_{F_{ij} = \text{Systemrotation}}
 \end{aligned} \tag{Glg. 3.22}$$

Die Terme C_{ij} , D_{ij}^L , P_{ij} and F_{ij} müssen nicht, die Terme D_{ij}^T , G_{ij} , ϕ_{ij} und ε_{ij} müssen modelliert werden, um die Gleichung 3.22 lösen zu können.

3.3.7.3 AVL HTM Model

Obwohl sich Reynolds Stress Modelle bei Industrieanwendungen bewähren, geht der Trend zu weniger komplizierten, stabileren Lösungen. Das AVL HTM Modell gehört wie das k - ε Modell zu den Zweigleichungsmodellen und wurde speziell für Turbulenzerscheinungen in Motorräumen entwickelt.

Hierbei wird laut AVL SWIFT Manual Teil Theory (2003) der C_μ -Koeffizient aus dem gemessenen Verhältnis $\overline{u_i u_j} / k$ für die Wandgrenzschichten berechnet und dann als konstanter Wert benutzt. Durch diese Annahme wird die turbulente Viskosität festgestellt und dann in den Transportgleichungen verwendet. Ein Schwachpunkt, neben der isotropen Form, liegt in der Ableitung der Konstanten C_μ , die nicht wie angenommen für eine bestimmte Strömung konstant ist, sondern schwankt. Deshalb wird eine Ableitung von C_μ vorgeschlagen, indem die Produktion der turbulenten kinetischen Energie durch das Reynolds-Stress-Modell und das k - ε Modells vorausgesagt wird. Druck- und Belastungsspannungen werden über die Formel von Boussinesq wie im Standard- k - ε Modell gekoppelt. Jedoch erhält man nach vollständiger Lösung der Reynolds Stress Transportgleichungen die turbulente kinetische Energie k .



3.3.8 Randbedingungen für die Turbulenzgrößen

Bei der Implementierung von Turbulenzmodellen muss festgelegt werden, wie die Profile turbulenter Größen in wandnahen Regionen verlaufen. Es wird häufig das Logarithmische Wandgesetz, eine Funktion mit dem dimensionslosen Wandabstand y^+ , der Werte zwischen 30 und 60 annimmt, eingeführt. Andere Wandüberbrückungsfunktionen sind das Zwei-Schichten-Modell oder die Nicht-Gleichgewichtsfunktionen. Daher kann im CFD-Code SWIFT 3.1 zwischen den verschiedenen **Wall Functions** *Momentum*, *Turbulence Quantities*, *Total Enthalpy – Temperature* und *Species* gewählt werden (vgl. AVL SWIFT Manual Teil Theory (2003)). In manchen Situationen, z.B. bei reibungsfreien Strömungen, ist die Wandschubspannung null oder vernachlässigbar. Für diese idealen Fälle werden **Slip Wall Boundaries** verwendet.

3.4 Diskretisierung

Für partielle Differentialgleichungen lassen sich in den seltensten Fällen exakte Lösungen angeben. Insbesondere für realitätsnahe Strömungsgebiete ist fast ausschließlich die näherungsweise numerische Berechnung auf dem Computer angezeigt. Dazu wird das kontinuierliche Problem durch Diskretisierung in ein endliches dimensionales Problem überführt.

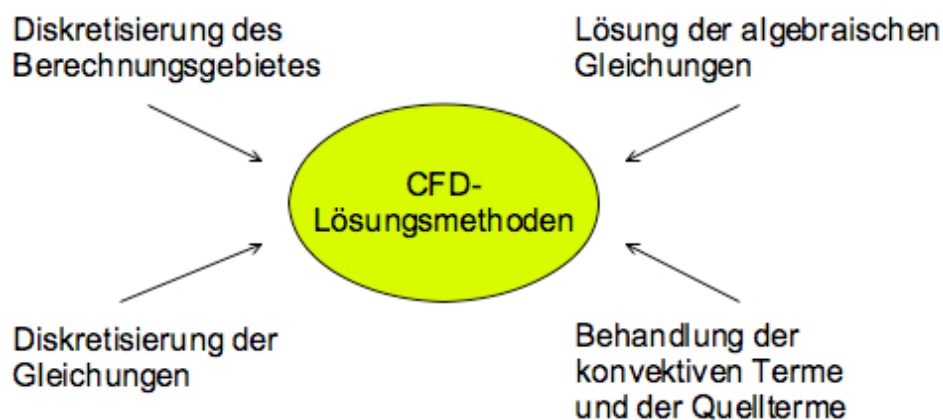


Abbildung 3.3: Berechnungsschritte bei der CFD-Simulation nach Martens (2000)

3.4.1 Definition der Strömungsberandung

Definierte Strömungsberandungen werden für das Lösen von mathematischen Gleichungen benötigt. Sie begrenzen die Bewegung des Fluids und spezifizieren Flüsse (z.B. Masse, Impuls, Energie) in das bzw. aus dem Berechnungsgebiet.

Im Bereich von Rändern sollten möglichst keine verzerrten Zellen vorkommen (grid skewness), große Gradienten normal zu Rändern sollten vermieden werden.

3.4.1.1 Inlet Boundaries

Berandungsbedingungen am Einlass geben Werte für Strömungsrichtung, Geschwindigkeit, Massenstrom und Temperatur vor und werden sowohl für kompressible als auch inkompressible Strömungen verwendet.

Bei der Angabe von Geschwindigkeitsprofilen sollte man sehr genau vorgehen. Die Daten sollten aus Messungen stammen oder vorher berechnet werden.

3.4.1.2 Outlet Boundaries

Auslässe sollten ausreichend weit stromabwärts von Regionen mit signifikanten Änderungen in der Strömung platziert werden.

3.4.1.3 Symmetry Boundaries

Symmetrische Ränder können zur Minimierung des Rechenaufwandes verwendet werden, wobei Strömungsfeld und Geometrie symmetrisch sein müssen.

3.4.1.4 Wall Boundaries

Randbedingungen an Wänden werden zur Abgrenzung von Fluid und Solid verwendet, wobei die Wand als glatt und undurchlässig angenommen wird. Bei realen Strömungen ist die Strömungsgeschwindigkeit des Fluids, welches mit der Wand in Kontakt steht, gleich der Wandgeschwindigkeit. Diese Bedingung wird durch die Spezifikation der Wandgeschwindigkeitskomponenten erzwungen.

3.4.1.5 Pressure Boundaries

Der statische Druck (als absolut Wert p_b) kann an einem oder mehr Rändern ungeachtet der Strömungsrichtung (Einlass oder Auslass der Strömung) vorgeschrieben werden.

$$p_b = \begin{cases} p_{\text{tot}} - \frac{\rho_b |u_b|^2}{2} & \text{für Eintritt} \\ p_{\text{tot}} & \text{für Austritt} \end{cases} \quad \text{Glg. 3.23}$$

3.4.2 Zeitschrittverfahren

Das Strömungsverhalten wird während der Durchführung der Simulation für einen bestimmten Zeitraum, der Simulationszeit, im zu untersuchenden System modelliert. Die Simulationszeit wird für die Berechnung in eine Anzahl von Zeitschritten unterteilt. Für jeden Zeitschritt wird die Lösung iterativ ermittelt. Während dieses Zyklus wird eine maximale



Anzahl an vorgegebenen Iterationen berechnet, oder er wird durch das Erreichen eines Konvergenzkriteriums beendet.

Der CFD-Code SWIFT 3.1 basiert auf einer impliziten Methodik. Im Gegensatz zu FIRE 7.3 spielt die Courant-Zahl damit für die Wahl des Zeitschrittes keine Rolle mehr. Im Wesentlichen orientiert sich die Größe des gewählten Zeitschrittes an den Randbedingungen, wobei bei Schwankungen Δt klein und bei konstanten Bedingungen Δt größer gewählt werden sollen, und an der Zellgröße (je kleiner die Zellgröße, desto größer der Zeitschritt Δt).

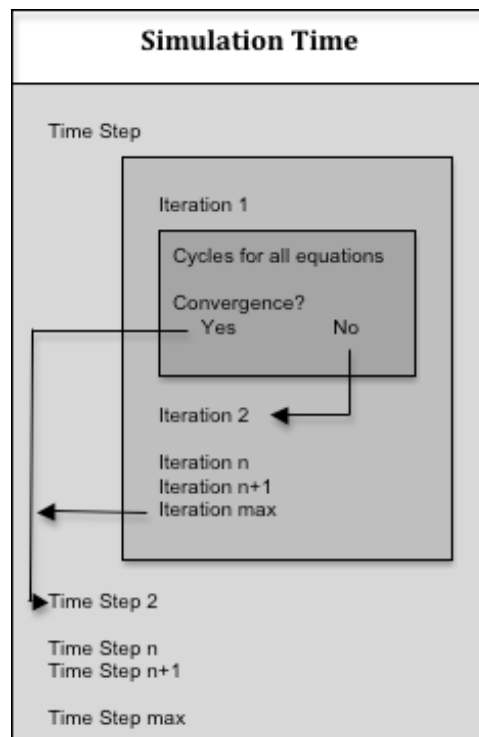


Abbildung 3.4: Ablauf einer iterativen Berechnung nach AVL SWIFT Manual Teil User's Guide (2000)

3.4.3 Diskretisierung des Zeiterms

Neben Konvektion und Diffusion ist auch der Zeiterm $\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}$ bei instationären Strömungen zu diskretisieren. Wie bei der Diskretisierung im Raum bedeutet Diskretisierung in der Zeit, dass der kontinuierliche Verlauf einer Größe ϕ nur an diskreten Stützstellen der Zeitkoordinate berechnet wird. Auch hier wird über im Rechenfeld ausgewiesene Kontrollvolumen integriert.

3.4.4 Diskretisierung des Berechnungsgebietes

Die Diskretisierung ist eine Methodik der Annäherung der Differentialgleichung durch ein System algebraischer Gleichungen an diskreten räumlichen und zeitlichen Punkten, wobei diese als Gitter- bzw. Netzpunkte oder als Zellen bezeichnet werden.

Die Transformation des physikalischen Modells in eine numerisch lösbare Form, kann als Diskretisierung des Volumens bezeichnet werden, wodurch es zur Ausbildung verschiedener Gittertypen (strukturierte, blockstrukturierte oder unstrukturierte Gitter) kommen kann.

Als Verfahren zur Diskretisierung werden die Finite-Differenzen-Methode (FDM), die Finite-Volumen-Methode (FVM) und die Finite-Elemente-Methode (FEM) verwendet.

3.4.4.1 Finite-Volumen-Methode (FVM)

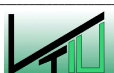
Der AVL CFD-Solver basiert auf der Finiten-Volumen-Methode (FVM), wobei er inkompressible, kompressible und Überschallströmungen berechnen kann. Die Überführung der Differentialgleichungen in algebraische Gleichungen besteht nach Noll (1993) bei der Methode der Finiten Volumen darin, die Differentialgleichungen über die einzelnen Kontrollvolumen zu integrieren. Was bedeutet, dass hier die integrale Form der Transportgleichung der eigentliche Ausgangspunkt ist. Zur Bestimmung der Ableitungen werden Werte auf den Zelloberflächen benötigt, wobei Annahmen bei der Bestimmung dieser Werte verwendet werden. Als Resultat ergibt sich für jedes Kontrollvolumen ein Satz linearer algebraischer Gleichungen, wobei die Lösung iterativ erfolgt. Die Rechenpunkte sind entweder die Mittelpunkt der Kontrollvolumina oder die Knoten des Rechengitters.

Vorteil dieser Methode ist die Erhaltung von Masse, Impuls und Energie auch in groben Gittern. Nachteilig können sich jedoch Diskretisierungsfehler durch ungenaue Interpolation nichtlinearer Profile, ungenügende Auflösung physikalischer Phänomene und numerische Diffusion auswirken.

Quellen numerischer Fehler sind Diskretisierungsfehler durch ungenaue Interpolation nichtlinearer Profile, ungenügende Diskretisierung des Volumens zur Auflösung physikalischer Phänomene und numerische Diffusion durch die Interpolationsmethode und das verwendete Gitter.

3.4.5 Diskretisierung der konvektiven und diffusiven Flüsse der Transportgleichungen

Bei der Diskretisierung nach der Methode der Finiten Volumen werden die Differentialgleichungen über die einzelnen Kontrollvolumen integriert. Die Volumsintegrale werden in Oberflächenintegrale nach dem Satz von Gauß umgewandelt, wobei die Annahme getroffen wird, dass die Strömungsgrößen konstant an den Kontrollvolumenflächen verteilt sind. Zur Ermittlung der Strömungsgrößen werden Annahmen über ihren Verlauf zwischen



den einzelnen Rechenpunkten getroffen, welche als Diskretisierungsansätze bezeichnet werden.

3.4.5.1 Diskretisierungsansätze

Die Methoden, mit denen die Werte von Variablen an Zellgrenzen berechnet werden, haben einen tiefen Effekt auf die Genauigkeit und Konvergenz des numerischen Modells.

Der AVL CFD Solver arbeitet neben dem *Upwind Differencing Scheme* (UDS) und dem *Central Differencing Scheme* (CDS) mit zwei begrenzten Ansätzen, dem MINMOD und dem AVL SMART.

Das ***Upwind Differencing Scheme* (UDS)** ist stark begrenzt, produziert aber starke numerische Diffusion wenn die Strömung nicht an das Rechengitter gebunden ist.

Eine verfeinerte Art des UDS ist das ***Central Differencing Scheme* (CDS)**, wobei zur Findung einer besseren Lösung ein Vermischungsfaktor eingeführt wird.

Weitere Möglichkeiten bieten das ***High-Order Upwind Scheme***, das **MINMOD** und das **AVL SMART**. (vgl. AVL SWIFT Manual Teil Theory (2003))

Eine generelle Angabe darüber, welche der oben angeführten Methoden die beste Lösung liefert, kann nicht getroffen werden.

3.4.6 Numerische Diffusion

Der Begriff der numerischen Diffusion sollte laut Noll (1993) im Zusammenhang mit den Diskretisierungsansätzen erläutert werden. Man versteht darunter die im physikalischen Sinn verfälschte Darstellung der Transportvorgänge aufgrund des verwendeten mathematischen Modells für die Diskretisierung. Die Wahl des Diskretisierungsansatzes hat deutlichen Einfluss auf die Ergebnisse. Ansätze höherer Ordnung liefern meist exaktere Lösungen als lineare Interpolationen.

3.4.7 Lösung der Erhaltungsgleichungen (SIMPLE-Algorithmus)

Druck und Geschwindigkeit im Strömungsfeld müssen bei der Strömungssimulation so ermittelt werden, dass die Kontinuität und Impulsbilanz gleichzeitig erfüllt werden. Verschiedene Lösungsansätze sind für diese Problemstellung vorhanden. Die Lösung der Transportgleichung erfolgt bei SWIFT 3.1 mit einer modifizierten Form des SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*)-Algorithmus, wobei die Strömungsvariablen hier in einen Näherungswert Φ^* und einen Korrekturwert Φ' geteilt werden.

$$p = p^* + p'$$

Glg. 3.24



$$u = u^* + u' \quad \text{Glg. 3.25}$$

$$v = v^* + v' \quad \text{Glg. 3.26}$$

Um das System zum Konvergieren zu bringen wird der Unterrelaxationsfaktor α_ϕ eingeführt, womit nur ein Teil der Korrekturfaktoren der jeweiligen Strömungsgröße in die Berechnung einbezogen wird. Unterrelaxationsfaktoren nahe Null ergeben stabilere Lösungen, verlängern aber die Berechnungszeit. Setzt man die Werte nahe Eins beschleunigt man das Finden einer Lösung, verringert aber die Stabilität der Iteration, wodurch die Schwankungsbreite der Strömungsgrößen Φ höher wird.

$$\Phi = \Phi^* + \alpha_\phi \cdot \Phi' \quad \text{mit } 0 \leq \alpha_\phi \leq 1 \quad \text{Glg. 3.27}$$

Folgende Schritte werden im SIMPLE-Algorithmus laut Frank (2000) ausgeführt:

1. Start mit einem „geschätzten“ Druckfeld p^* .
2. Lösung der diskretisierten Erhaltungsgleichungen mit p^* als Ausgangswert.
3. Lösung der Druck-Korrektur-Gleichung für p' .
4. Berechnung von $p = p^* + p'$.
5. Berechnung von u und v aus den Geschwindigkeits-Korrektur-Formeln.
6. Lösung der diskretisierten Erhaltungsgleichungen für die anderen Variablen Φ (Turbulenzgrößen, Temperatur, Konzentration, etc.), wenn diese Variablen das Strömungsfeld durch Fluideigenschaften, Quellterme, etc. beeinflussen. (Wenn eine Variable Φ das Strömungsfeld nicht beeinflusst, so ist es besser, die entsprechende Erhaltungsgleichung erst nach Berechnung einer konvergenten Lösung für das Strömungsfeld zu lösen.)
7. Der berechnete Druck p wird als neuer Startwert für ein geschätztes Druckfeld p^* behandelt. Die Schritte 2 bis 7 werden wiederholt, bis eine konvergente Lösung erzielt worden ist.

3.5 Beurteilung der Ergebnisse

Um die Qualität der mit Hilfe der numerischen Strömungsmechanik gefundenen Resultate zu verifizieren, müssen die Ergebnisse der Berechnung kritisch nach Fehlerquellen getrennt betrachtet werden. Als Fehlerquellen kommen falsche Annahmen in der Berechnung bezüglich des Strömungsverhaltens, also physikalische Fehler, numerische Fehler und Diskretisierungsfehler in Frage.



4 Modul Porosity

Das Modul Porosity des Programms SWIFT Version 3.1 zur Simulation von gerichteter und ungerichteter Porosität, bietet die Möglichkeit druckverlustbehaftete Strömungsabschnitte, deren räumliche Diskretisierung für die Problemstellung zu aufwendig wird, zu definieren und wird laut AVL SWIFT Manual Teil Porosity (2003) für Apparate mit kleinen Strukturen verwendet:

- Katalysatoren
- Wärmetauscher
- poröses Material
- Filter

4.1 Grundlagen und Strömungswiderstand

Da oft im Strömungsbereich nicht alle geometrischen Details berücksichtigt werden können, bietet das Modul Porosity die Möglichkeit druckverlustbehaftete Strömungsabschnitte im Modell abzubilden. Die an einer Oberfläche des porösen Kontrollvolumens eintretende Strömung u ist definiert als Volumenstrom pro Querschnittsfläche. Die lokale Geschwindigkeit w_{Pore} in der porösen Schicht und die Geschwindigkeit im freien Gasstrom $u_{\text{freestream}}$ sind durch ψ miteinander verbunden:

$$w_{\text{Pore}} = \frac{u_{\text{freestream}}}{\psi} \quad \text{Glg. 4.1}$$

Der Lückenvolumenanteil ψ ist das Verhältnis des für die Strömung zur Verfügung stehenden Volumens in der porösen Schicht durch das von Strömung und Feststoff besetzte Gesamtvolumen.

4.2 Porositätsmodelle

Ein sehr einfaches Modell (vgl. Glg. 4.2) erster Ordnung zur Berechnung von Strömungen in porösem Material von Darcy (1851) stellt einen linearen Zusammenhang zwischen dem Druckverlustgradienten Δp und der Oberflächengeschwindigkeit u her, wobei ΔL die Länge, μ die dynamische Viskosität und κ die Permeabilität des porösen Materials wiedergibt.

$$\frac{\Delta p}{\Delta L} = - \frac{\mu}{\kappa} u \quad \text{Glg. 4.2}$$



Da dieses Modell den Einfluss von Strömungswiderstand und Reibung nicht berücksichtigt, und um eine bessere Übereinstimmung mit experimentell ermittelten Daten zu erreichen, benutzt der CFD-Code SWIFT 3.1 ein erweitertes Modell (vgl. Glg. 4.3). Dieses setzt sich aus dem von Darcy und einem von Forchheimer (1901) vorgeschlagenem Modell zusammen. Es wird für Strömungen in allgemeinen porösen Schichten oder für die Abbildung von Wärmetauschern verwendet, wobei der quadratische Term in der Gleichung den Widerstand der Porosität berücksichtigt.

$$\frac{\Delta p}{\Delta L} = \sum_{i=1}^3 \left(-\alpha_i \mu u_i - \zeta \frac{\rho u_i^2}{2} \right) \quad [\text{N/m}^3] \quad \text{Glg. 4.3}$$

ζ ist der dynamische Druckverlustkoeffizient (Zeta-Wert) und ρ die Dichte des Strömungsmediums.

Für die Beschreibung der druckverlustbehafteten Strömung in Katalysatormodulen kommt die vereinfachte Gleichung 4.4 zum Einsatz, wobei α und β Wärmedurchgangskoeffizienten des Energiegesetzes sind, die empirisch ermittelt werden müssen.

$$\frac{\Delta p}{\Delta L} = -\alpha u^\beta \quad [\text{N/m}^3] \quad \text{Glg. 4.4}$$

Ein weiteres Modell berücksichtigt den Einfluss der Wandreibung auf den Druckverlust innerhalb der Kanäle eines Katalysators. Hierfür werden die Rohrreibung λ und der hydraulische Durchmesser der Kanäle d_h eingeführt, woraus sich

$$\frac{\Delta p}{\Delta L} = - \sum_{i=1}^3 \frac{\lambda}{d_h} \frac{\rho}{2} w_i^2 \quad [\text{N/m}^3] \quad \text{mit } d_h = \frac{4A}{L_{\text{por}}} \quad \text{Glg. 4.5}$$

ergibt. Der hydraulische Durchmesser d_h von Katalysatorkanälen wird aus dem vierfachen Querschnitt durch die benetzte Strecke, das integrale Längenmaß, berechnet. Die lokale Geschwindigkeit in alle drei Raumrichtungen leitet sich aus Gleichung 4.1 ab. Im Fall laminarer Strömung (Hagen-Poiseuille) wird λ_L mit $\varphi = 1$ für runde Querschnittsflächen und $\varphi = 0,89$ für quadratische Querschnittsflächen berechnet. Bei turbulenter Strömung wird Gleichung 4.7 zur Berechnung der Rohrreibung herangezogen.

$$\lambda_L = \varphi \frac{64}{\text{Re}_d} \quad \text{Glg. 4.6}$$

$$\lambda_T = \frac{0,316}{\text{Re}_d^{1/4}} \quad \text{mit } \text{Re}_d = \frac{d_h w \rho}{\mu} \quad \text{Glg. 4.7}$$



4.3 Porosität mit Wärmeübergang

Im Allgemeinen ist der Quellterm \dot{q} der Energiegleichung die überführte Energie pro Zeit- und Flächeneinheit (= Wärmestromdichte). Im hier vorliegenden Fall eines porösen Blockes (Wärmetauschers) muss jedoch der Wärmeübergangskoeffizient α in einen volumetrischen Wärmedurchgangskoeffizienten β transformiert werden.

$$\Delta Q = \dot{q} \cdot A_{\text{tot}} \cdot \Delta t = \alpha \cdot \overline{\Delta T} \cdot A_{\text{tot}} \cdot \Delta t = \beta \cdot \overline{\Delta T} \cdot V_{\text{tot}} \cdot \Delta t \quad \text{Glg. 4.8}$$

Aus Gleichung 4.8 ergibt sich somit für

$$\beta = \frac{A_{\text{tot}}}{V_{\text{tot}}} \alpha \quad \text{Glg. 4.9}$$

mit der Gesamtoberfläche A_{tot} und des Gesamtvolumens V_{tot} des Wärmetauschers.

Zur Abschätzung des volumetrischen Wärmedurchgangskoeffizienten β kann eine stationäre Energiegleichung herangezogen werden.

$$\rho c_p u \frac{\partial T}{\partial x} = \beta (T - T_W) \quad \text{Glg. 4.10}$$

Wird konstante Dichte und Strömungsgeschwindigkeit benutzt und der Massestrom $m = \rho v A$ eingeführt, kann nach Integration β wie folgt ausgedrückt werden:

$$\beta = \frac{\rho u c_p}{\Delta L} \ln \left(\frac{T_{\text{ein}} - T_W}{T_{\text{aus}} - T_W} \right) \quad \text{Glg. 4.11}$$

Der β -Wert wird durch oben angeführte Transformation so angepasst, dass der Temperaturgradient bei eingehaltenem Volumen des Wärmetauschers den gewünschten Wert annimmt.

4.4 Turbulenz im porösen Block

Die Turbulenz im Bereich von porösem Material ist relevant für eine Strömungsfeldberechnung in Katalysatoren, für Wärmeübergangsprobleme, für Strömungsberechnungen in Regionen, die an poröses Material angrenzen, wie zum Beispiel die Austrittsfläche eines Katalysators oder Wärmetauschers.

Erfahrungswerte zeigen, dass durch Gleichung 4.3 die reibungsbehaftete Strömung in porösen Körpern gut wiedergegeben werden kann. Die Änderung der Turbulenz in porösen



Schichten kann mit Hilfe des integrale Längenmaßes L_{por} abgeschätzt werden. Dabei wird die Dissipationsrate ε gemäß Gleichung 4.12 aus k und L_{por} berechnet.

$$\varepsilon = C_{\mu}^{3/4} \frac{k^{3/2}}{L_{\text{por}}} \quad [\text{m}^2/\text{s}^3] \quad \text{Glg. 4.12}$$

Ein für SCR-Katalysatoren passender Wert für L_{por} muss erst über experimentelle Versuche ermittelt werden, da er sich aufgrund des großen Kanaldurchmessers wesentlich von jenen Werten für Kfz-Katalysatoren unterscheiden wird. Üblicherweise wird L_{por} jedoch nach Gleichung 4.13 berechnet.

$$L_{\text{por}} = 0,3 \cdot d_h \quad \text{Glg. 4.13}$$

Unterschiedliche Bauweisen im porösen Strömungsabschnitt, die auf das turbulente Feld eine Auswirkung haben, können im Modell nicht berücksichtigt werden. So kann z.B. bei Wärmetauschern nicht zwischen Röhren- und Platteneinbauten unterschieden werden.

5 Modul Species Transport

Das Modul Species Transport beinhaltet laut AVL SWIFT Manual Teil Species Transport (2003) die notwendigen Transportgleichungen für Gasphasenspezies im Berechnungsgebiet. Abhängig von der Art der Anwendung kann zwischen zwei Hauptoptionen gewählt werden:

Das **Standard Species Transport** Modell wird für Verbrennungsvorgänge verwendet, wobei das System der chemischen Verbindungen vordefiniert ist und aus Kohlenwasserstoffen C_nH_m , Sauerstoff O_2 , CO_2 , H_2O und N_2 besteht.

Im General Species Transport Modell können die Rauchgaszusammensetzungen in Massenbrüchen angegeben werden. Die Anzahl der angegebenen Rauchgaskomponenten ist nur durch die Rechenleistung des Computers begrenzt. Für jede Rauchgaskomponente wird die skalare Spezies transportgleichung (vgl. Kapitel 3.3.5, Glg. 3.10) gelöst. Im Programm werden die chemischen Spezies als aktive Skalare behandelt und werden daher im SIMPLE-Algorithmus gelöst. Im Gegensatz dazu stehen passive Skalare, die skalare Transportgleichung wird hier erst nach Lösen des Strömungsfeldes berechnet.

Die Transportgleichung kann über

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho(U_i - U_{\delta i})m_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{m_i}^{ji} \frac{\partial m_i}{\partial x_j} \right) + S_{m_i} \quad k = 1 \dots K_{\text{gas}} \quad \text{Glg. 5.1}$$

mit
$$\Gamma_{m_i} = \left(\rho D_{k,m} + \frac{\mu_\tau}{Sc_t} \right) \quad \text{Glg. 5.2}$$

$$S_{m_i} = r_i \cdot M_i \cdot V_{\text{Cell}} \quad \text{Glg. 5.3}$$

ausgedrückt werden, wobei m_i den Massenbruch der Spezies i präsentiert. $D_{k,m}$ spiegelt den Diffusionskoeffizienten der Spezies k in Mischung wieder, die Schmidt-Zahl Sc gibt die Diffusionsgeschwindigkeit an und kann für jede Spezies extra definiert werden. Im Quellterm S_{m_i} werden chemische Reaktionen berücksichtigt, wobei r_k die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante ist.

6 Modul Aftertreatment

Das Modul *Aftertreatment* des Programms SWIFT 3.1 ermöglicht die Simulation von chemischen und physikalischen Prozessen in Katalysatoren. Es werden sowohl heterogene chemische Reaktionen, als auch Adsorption und Desorption von Spezies auf der Katalysatoroberfläche simuliert.

Vorgänge in folgende Katalysatorarten können berechnet werden:

- Drei-Wege-Katalysator
- Diesel-Oxidations-Katalysator
- NO_x-Speicher-Katalysator
- SCR-Katalysator
- Reformer-Katalysator

6.1 Grundlagen

Katalysatoren werden als heterogene Reaktoren gesehen, da sie eine Gasphase (Reaktanden und Produkte) und einen soliden Katalysator beinhalten. Da katalytische Reaktionen am Katalysator ablaufen, müssen die Reaktanden zur äußeren Grenzfläche zwischen gasförmig und fest transportiert werden. Die Modellierung des Prozesses erfordert die Berücksichtigung des physikalischen Transportes und der chemischen Kinetik.

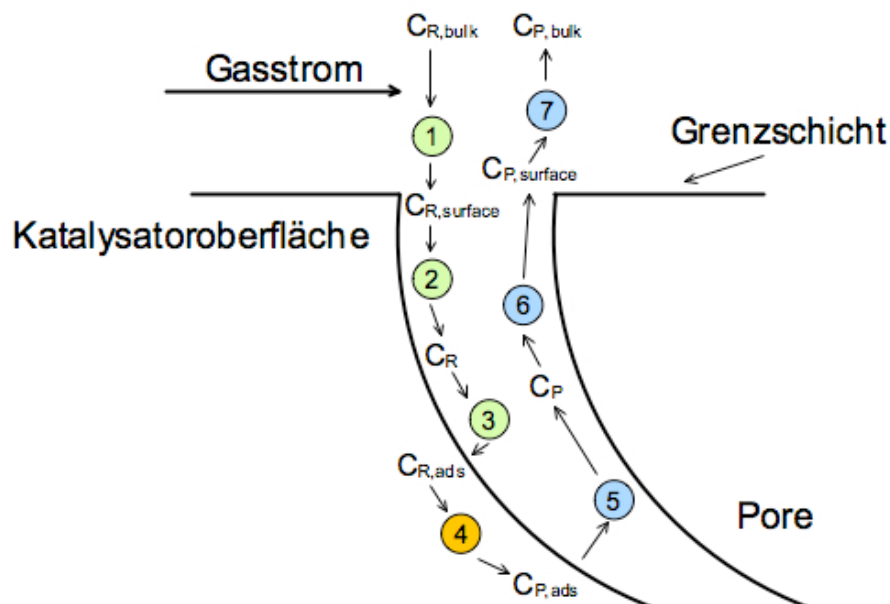


Abbildung 6.1: Katalytische Reaktion nach AVL SWIFT Manual Teil Aftertreatment (2003)

Folgende Vorgänge treten bei einer katalytischen Reaktion auf und werden in Abbildung 6.1 beschrieben:

1. Transport der Reaktanden vom Gasstrom zur äußeren Katalysatoroberfläche durch die Grenzschicht. (physikalischer Transport)
2. Diffusion der Reaktanden zur porösen Schicht des Katalysators, da sich hier der Großteil des Katalysatorstoffes befindet. (physikalischer Transport)
3. Adsorption der Reaktanden auf der Oberfläche. (chemische Kinetik)
4. Katalytische Reaktion an der Oberfläche. (chemische Kinetik)
5. Desorption der Reaktionsprodukte. (chemische Kinetik)
6. Diffusion der Produkte von der Katalysatoroberfläche. (physikalischer Transport)
7. Transport der Produkte in den Gasstrom. (physikalischer Transport)

Um diesen Effekten gerecht zu werden, wird zwischen folgenden Arten von Spezies unterschieden:

- Gasphasen Spezies:
 $C_{i,bulk}$: Konzentration im Gasstrom (Transportgleichung)
 $C_{i,surf}$: Konzentration direkt über der Katalysatoroberfläche
- Adsorbierte Spezies, welche einen Platz auf der Katalysatoroberfläche besetzt. Die Anzahl der Plätze ist begrenzt.

6.2 Differentialgleichungssystem für die heterogene Kinetik

Aufgrund der chemischen Reaktionen auf der Oberfläche des Katalysators, sind die Stoffkonzentrationen direkt über der Katalysatoroberfläche nicht gleich derer im Gasstrom. Dieser Effekt kann durch Gleichung 6.1 für jede Spezies in der Gasphase beschrieben werden, wobei $c_{k,surf}$ die Massenkonzentration pro Flächeneinheit, $c_{k,bulk}$ die Massenkonzentration im Gasstrom, r_k die Reaktionsrate der Spezies k , t die Zeit und a_{mass} die spezifische Oberfläche des Katalysators angeben.

$$\frac{\partial c_{k,surf}}{\partial t} = r_k - a_{mass} k_{k,m} (c_{k,surf} - c_{k,bulk}) \quad k = 1 \dots K_{gas} \quad \text{Glg. 6.1}$$

Die Menge eines bestimmten Stoffes, der von der Katalysatoroberfläche gebunden wird, wird als Oberflächenfraktion θ_k angegeben und wird durch Gleichung 6.2 ausgedrückt.

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial t} (\theta a_{reac}) = r_k \quad k = 1 \dots K_{stor} \quad \text{Glg. 6.2}$$



a_{reac} gibt hier die reaktive Oberfläche des Katalysators an, Θ steht für die Dichte der Besetzung der Oberfläche durch die Spezies k .

Für die heterogene Kinetik ergibt sich ein nichtlineares Differentialgleichungssystem, das über die Zeit integriert wird. Das Ergebnis der Berechnung geht als Senkenquellterm in die Berechnung der Transportgleichung ein. Die Temperaturen der Gasphase und des Festkörpers werden während der Integration der Differentialgleichungen konstant gehalten. Während der Lösung der Transportgleichung werden die aus der Berechnung der Kinetikrate stammenden Quellterme konstant gehalten. Dadurch kann es jedoch, besonders wenn die Reaktionen sehr schnell laufen oder Probleme mit dem chemischen Gleichgewicht vorhanden sind, zu Konvergenzproblemen kommen. Eine Problemlösung dafür kann die Verkleinerung des Zeitschrittes darstellen.

6.3 Berechnung der chemischen Reaktionsrate

Eine chemische Reaktion kann in folgender allgemeiner Form wiedergegeben werden:



Der stöchiometrische Koeffizient wird durch v , welcher für die Spezies k in Reaktion i in Gleichung 6.4 definiert wird, das chemische Symbol der Spezies k wird in Gleichung 6.3 durch κ abgebildet. K ist die Gesamtanzahl der beteiligten Spezies und I die Gesamtanzahl der ablaufenden chemischen Reaktionen.

$$v_{ki} = v'_{ki} - v''_{ki} \quad \text{Glg. 6.4}$$

Für die Produktionsrate \dot{r}_k der Spezies k ergibt sich mit der Reaktionsrate \dot{q}_i folgender Zusammenhang:

$$\dot{r}_k = \sum_{i=1}^I v_{ki} \dot{q}_i \quad \text{Glg. 6.5}$$

Die Reaktionsrate \dot{q}_i der Reaktion i wird definiert als die Differenz der Hin- und Rückreaktionsraten.

$$\dot{q}_i = k_f \prod_{k=1}^K [c_k]^{v'_{ki}} - k_r \prod_{k=1}^K [c_k]^{v''_{ki}} \quad \text{Glg. 6.6}$$

$$\text{mit: } c_k = y_k \frac{P}{RT} \quad [\text{kmol/m}^3] \quad \text{für gasförmige Spezies} \quad \text{Glg. 6.7}$$



$$c_k = \theta_k \Theta \quad [\text{kmol/m}^3] \quad \text{für gebundene Spezies} \quad \text{Glg. 6.8}$$

Bei gasförmigen Spezies wird von einem idealen Gas ausgegangen. In Gleichung 6.7 steht y_k für den Molenbruch der Spezies k , P für den Druck, R für die Gaskonstante und T für die Temperatur.

Die Reaktionsrate für die Hinreaktion k_{fi} wird über die in Gleichung 6.9 beschriebene Temperatur-Beziehung nach Arrhenius berechnet. A_i wird als präexponentieller Faktor, E_i als Aktivierungsenergie und β_i als Temperaturexponent der Reaktionsrate der Reaktion i eingeführt.

$$k_{fi} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right) \quad \text{Glg. 6.9}$$

Für irreversible Reaktionen wird die Reaktionsrate für Rückreaktionen k_{ri} laut Definition null gesetzt. Für reversible Reaktionen gilt folgender Zusammenhang:

$$k_{ri} = \frac{k_{fi}}{K_{ci}} \quad \text{Glg. 6.10}$$

K_{ci} steht für die Gleichgewichtskonstante der ablaufenden Reaktion i . Die Gleichgewichtskonstante K_{pi} bezogen auf den herrschenden Druck, wird über nachstehende Beziehung von Gibbs formuliert und beinhaltet die Enthalpie- und Entropieänderungen, wobei S_k die Entropie und H_k die Enthalpie der Spezies k ist.

$$K_{pi} = \exp\left(\frac{\Delta S_i}{R} - \frac{\Delta H_i}{RT}\right) \quad \text{mit} \quad \frac{\Delta S_i}{R} = \sum_{k=1}^K v_{ki} \frac{S_k}{R} \quad \text{Glg. 6.11}$$

$$\frac{\Delta H_i}{RT} = \sum_{k=1}^K v_{ki} \frac{H_k}{RT}$$

Schließlich kann die Gleichgewichtskonstante K_{ci} wie folgt über K_{pi} ausgedrückt werden:

$$K_{ci} = \left(\frac{P}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^{K_{\text{gas}}} v_{ki}} \Theta^{\sum_{k=1}^{K_{\text{stor}}} v_{ki}} K_{pi} \quad \text{Glg. 6.12}$$

6.3.1 Klebekoeffizient

Für Oberflächenreaktionen mit nur einer Gasphasenspezies ist die Reaktionsrate über den Klebekoeffizienten (Glg. 6.13) berechenbar, da die Möglichkeit besteht, dass Moleküle an der Oberfläche „kleben“ bleiben, wenn eine Kollision stattfindet. Die drei Parameter a_i , b_i , c_i werden wie Arrheniusparameter eingesetzt, wobei a_i und b_i dimensionslos sind und c_i in [kJ/kmolK] angegeben wird.

$$\gamma_i = \min\left[1, a_i T^{b_i} e^{c_i/RT}\right] \quad \text{Glg. 6.13}$$

Für die Transformation der Reaktionsraten aus Gleichung 6.10 in die Kinetikrate k_{fi} wird folgende Gleichung verwendet:

$$k_{fi} = \left(\frac{\gamma_i}{1 - \gamma_i/2}\right) \frac{1}{\Gamma_{\text{tot}}^m} \sqrt{\frac{RT}{2\pi W_k}} \quad \text{Glg. 6.14}$$

W_k ist das molekulare Gewicht der Spezies k , Γ_{tot} ist die Gesamtoberflächenkonzentration und m ist die Summe aller stöchiometrischen Koeffizienten der Oberflächenspezies. Die Reaktionsrate kann somit über Gleichung 6.6 berechnet werden.

6.4 Transportgleichungen

Die Wärmetransportgleichung für anisotropen Wärmeübergang an den gasförmig-festen Grenzflächen des porösen Materials wird bezüglich des Quellterms nach Gleichung 6.15 modelliert, wobei K die anisotrope Wärmeübergangsmatrix, k_h der Wärmeübergangskoeffizient für gasförmig-fest, a_{mass} die geometrische Oberfläche je Volumseinheit, T_g und T_s die Temperaturen von Gas und Feststoffoberfläche, S_r die chemische Bildungsrate, V das Zellvolumen, V_s der Feststoffanteil am Zellvolumen und A_s der Feststoffanteil an der Zelloberfläche sind.

$$\int_{V_s} \rho_s c_{p,s} \frac{\partial T}{\partial t} dV = \int_{A_s} \left(\overline{K \nabla T}\right) \vec{n} dS + k_h a_{\text{mass}} V (T_g - T_s) + S_r \quad \text{Glg. 6.15}$$

Die folgenden Bildungsrate für jede Spezies k werden auf der rechten Seite der entsprechenden Speziestransportgleichung (Glg. 5.1) hinzugefügt:

$$S_{m_i} = r_k W_k V_{\text{cell}} \quad \text{Glg. 6.16}$$

Wobei r_k die Reaktionsrate der Spezies k in kmol/(m³s) und W_k das molekulare Gewicht der Spezies k ist.



7 Fallbeispiel SCR-Anlage Laut

7.1 Ausgangssituation

Die Müllverbrennungsanlage Laut, im Bundesland Sachsen, Deutschland, die im Frühjahr 2004 in Betrieb ging, ist für die Verbrennung von 225.000 t Restmüll pro Jahr konzipiert. Die Anlage umfasst laut Austrian Energy (2001) neben den für die thermische Verwertung notwendigen Anlagenteilen eine mehrstufige Rauchgasreinigungsanlage, wobei sich die vorliegende Arbeit mit der Optimierung der SCR-Anlage zur Rauchgasentstickung befasst. Eine numerische Strömungssimulation für den Strömungsabschnitt vom Vorlauf-Wärmetauscher bis zum Katalysatornachlauf am Ende der DeNox-Anlage wurde durchgeführt.

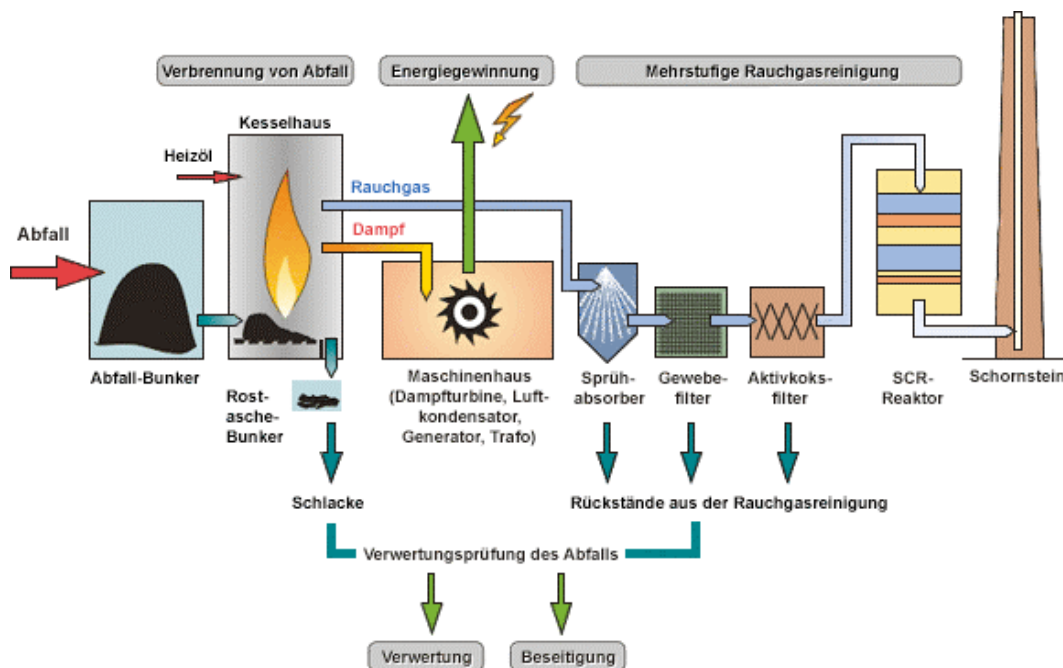


Abbildung 7.1: Funktionsschema der TA Laut (www.ravon.de)

Tabelle 7.1: Rauchgasstrom der SCR-Anlage Lautau

| Parameter | Bereich min-max | | Einheit |
|---|---------------------|-----------------------|-----------------------|
| Volumenstrom (Nominallast TMW) | 81.390 ¹ | | Nm ³ /h f. |
| Lastbereich ² | max. 117 | | % |
| Volumenstrom ² | 47.600 – 95.000 | | Nm ³ /h f. |
| Temperatur vor SCR | 170 | | °C |
| H ₂ O | 15 - 25 | | Vol.% f. |
| CO ₂ | 7 - 11 | | Vol. % |
| O ₂ | 6 - 10 | | Vol. % |
| N ₂ | 60 - 75 | | Vol. % |
| NO _x ³ | 330 | | mg/m ³ |
| Staub ³ | < 5 | | mg/m ³ |
| SO ₂ /SO ₃ als SO ₂ ³ | < 10 | | mg/m ³ |
| HCl ³ | < 10 | | mg/m ³ |
| HF ³ | < 1 | | mg/m ³ |
| CO ⁴ | 30 | | mg/m ³ |
| Hg ³ | 0,05 | | mg/m ³ |
| Cd und Ti ³ | < 0,05 | | mg/m ³ |
| Additivstrom | | | |
| NH ₃ | 1,809 | | Vol. % |
| O ₂ | 24,458 | | Vol. % |
| N ₂ | 74,643 | | Vol. % |
| Eindüsung NH ₄ OH | 35 [kg/h] | davon NH ₃ | 8,75 [kg/h] |
| NO _x -Abscheidung | 79% | | |

¹ Tagesmittelwert

² Überlast von 107% gegenüber Nominalrauchgasmenge ca. 3h pro Tag (Russblasen), Regelabweichung 117%

³ bezogen auf trockenes Rauchgas, Normalbedingungen (0°C, 1013 mbar), 8% O₂

⁴ bezogen auf trockenes Rauchgas, Normalbedingungen (0°C, 1013 mbar), 11% O₂



Folgenden Arbeiten wurden im Rahmen der vorliegenden Diplomarbeit durchgeführt:

- 2D- und 3D-Simulation des Wärmetauschers, Anpassung der erforderlichen Eingabedaten für den 100%-Lastfall.
- Optimierung der Ammoniakendüsung durch Anpassung der Eindüsungsgeschwindigkeit.
- Überprüfung und Bewertung der im Programm implementierten Turbulenzmodelle, $k\epsilon$ -Modell, RSM und AVL HTM.
- 2D- und 3D-Simulation der Katalysatorblöcke mit Darstellung des NO_x -Stoffabbaus.

7.2 Vorgangsweise

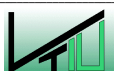
Die Strömungssimulation erfolgte mit dem CFD-Paket SWIFT Version 3.1 der Firma AVL List GmbH. Unter Verwendung der CAD-CFD-Kopplung wurden die numerischen Strömungsmodelle mit dem zum CFD-Paket gehörenden Netzgittergenerator FAME erzeugt. Das Ergebnis ist ein Strömungsbereich, der durch finite Volumina in Hexaederform aufgelöst ist. Im Finite-Volumen-Verfahren wird dann die Massen-, Energie- und Impulsbilanz unter Verwendung der Submodule Porosity, Species Transport und Aftertreatment für jede Zelle gelöst. Die Rauchgaskomponenten wurden als skalare Transportgrößen in der numerischen Berechnung berücksichtigt.

Für die Turbulenzmodellierung kamen das $k\epsilon$ -Modell, das RSM und das AVL HTM Turbulenzmodell zum Einsatz. Wesentliche Einbauten, wie Leitbleche und Rohre, wurden in den Strömungsmodellen berücksichtigt. Der Gasvorwärmer vor der Ammoniakendüsung und die drei Katalysatorblöcke wurden als poröse Schichten modelliert. Da sich aus den einzelnen Testfällen keine signifikanten Unterschiede der Ergebnisse durch Verwenden der einzelnen Turbulenzmodelle zeigten, wurde im Weiteren mit dem $k\epsilon$ -Modell als Turbulenzmodell gerechnet.

Um die notwendigen Teilmodule für die Simulation der gesamten SCR-Anlage austesten zu können, wurde die Anlage in Unterabschnitte unterteilt. Der erste Abschnitt beinhaltet den Gasvorwärmer (Wärmetauscher), der zweite die Ammoniakendüsung und der dritte die drei Katalysatorschichten. Nach Testen der Module Porosity, Species Transport und Aftertreatment im 2D- und 3D-Fall wurden die Module in ihrer Anwendung kombiniert getestet.

7.2.1 Wärmetauscher

Um einen optimalen Stickoxidabbau im Fall von Lauta zu erhalten, muss das Abgas mit einer Temperatur von 417 K am Eingang der SCR-Anlage mittels eines Wärmetauschers (Röhren



mit heißem Wasserdampf, Temperatur von 463 K) auf eine Temperatur von 448 K erwärmt werden.

Probleme treten hierbei im Temperaturprofil durch unterschiedlich lange Durchgangszeiten des Strömungsmediums auf. Es entstehen Temperaturschieflagen, die in Folge Unterschiede im NO_x-Abbau bewirken.

Zur Berechnung der einzelnen Werte wurden folgende Daten des Wärmetauschers der Anlage Lautau herangezogen (vgl. Tabelle 7.2). Der Temperaturverlauf wird in der Rechnung als linear angenommen, obwohl sich in der Realität ein nichtlineares Temperaturprinzip aufgrund des Kontaktprinzips (Kreuzstrom) einstellt.

Tabelle 7.2: Technische Daten des Wärmetauschers der Anlage Lautau

| Parameter | Wert | Einheit |
|---|---------------------|-------------------|
| Breite des Wärmetauschers B | 4,000 | m |
| Tiefe des Wärmetauschers T | 2,200 | m |
| Länge in Fließrichtung L | 0,805 | m |
| Temperatur Eintritt T _{ein} | 417 | K |
| Temperatur Austritt T _{aus} | 448 | K |
| Temperatur Kühl/Heizmaterial T _w | 463 | K |
| Dichte ρ | 0,762 | kg/m ³ |
| Wärmekapazität c _p von Luft bei T = 417K | 1046,700 | J/kgK |
| Geschwindigkeit v | 4,168 | m/s |
| Druckverlust Δp | 1,5·10 ² | Pa |

Werte für β und ζ werden nach folgenden Gleichungen berechnet, welche sich aus den Bestimmungsgleichungen 4.8 und 4.9 ergeben. Die verwendeten Eingabewerte können aus Tabelle 7.3 entnommen werden.

$$\beta = \frac{\rho v c_p}{L} \cdot \ln \left(\frac{T_{\text{ein}} - T_w}{T_{\text{aus}} - T_w} \right) \quad \text{Glg. 7.1}$$

$$\zeta = \frac{2 \cdot \Delta p}{L \rho v^2} \quad \text{Glg. 7.2}$$

Tabelle 7.3: Eingabedaten im Modul Porosity für den Wärmetauscher

| Bezeichnung - deutsch | Bezeichnung - Swift intern | Wert | Einheit |
|--|-----------------------------------|----------|--------------------|
| dynamischer Druckverlustkoeffizient (Zeta-Wert) ζ (vgl. Glg. 4.3) | converter Zeta value | 28,145 | 1/m |
| Porositätswert ψ | volume fraction | 0,99 | - |
| Turbulentes Längenmaß | turbulent length scale | 0,01 | m |
| Wärmedurchgangskoeffizient β | heat transfer coefficient β | 4628,666 | W/m ³ K |
| Kühlmitteltemperatur | coolant temperature | 463 | K |
| Definition des Porositätsvektors | definition of porosity vector | Manual | - |
| Inverser Porositätsvektor | reverse porosity vector | Off | - |
| Richtungsvektor | direction vector | 1/0/1 | |
| Porositätsparameter (Alpha-Wert) α_i | Alpha value | 0/0/0 | 1/m ² |

Das benutzte Netzgitter (Abbildung 7.3) ist ein 2D-Netz mit 21.656 Zellen.

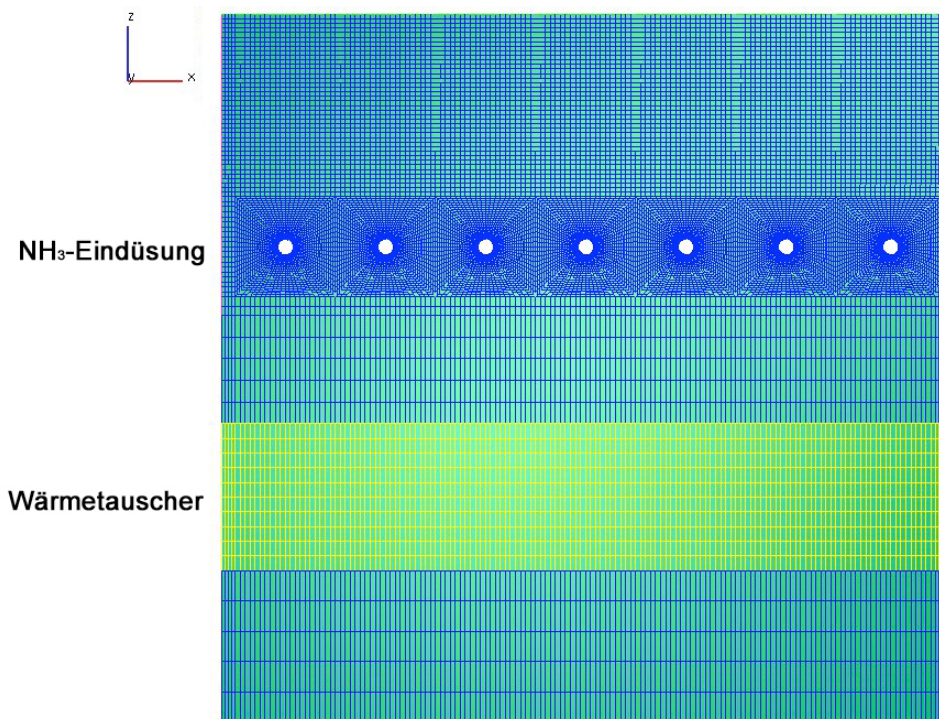


Abbildung 7.3: Netzgitter der 2D-Wärmetauscherrechnung

Abbildung 7.4 zeigt eine Detailansicht des Bereichs der NH_3 -Eindüsung über dem Wärmetauscher. Die Stromführung des Gases verläuft von unten nach oben.

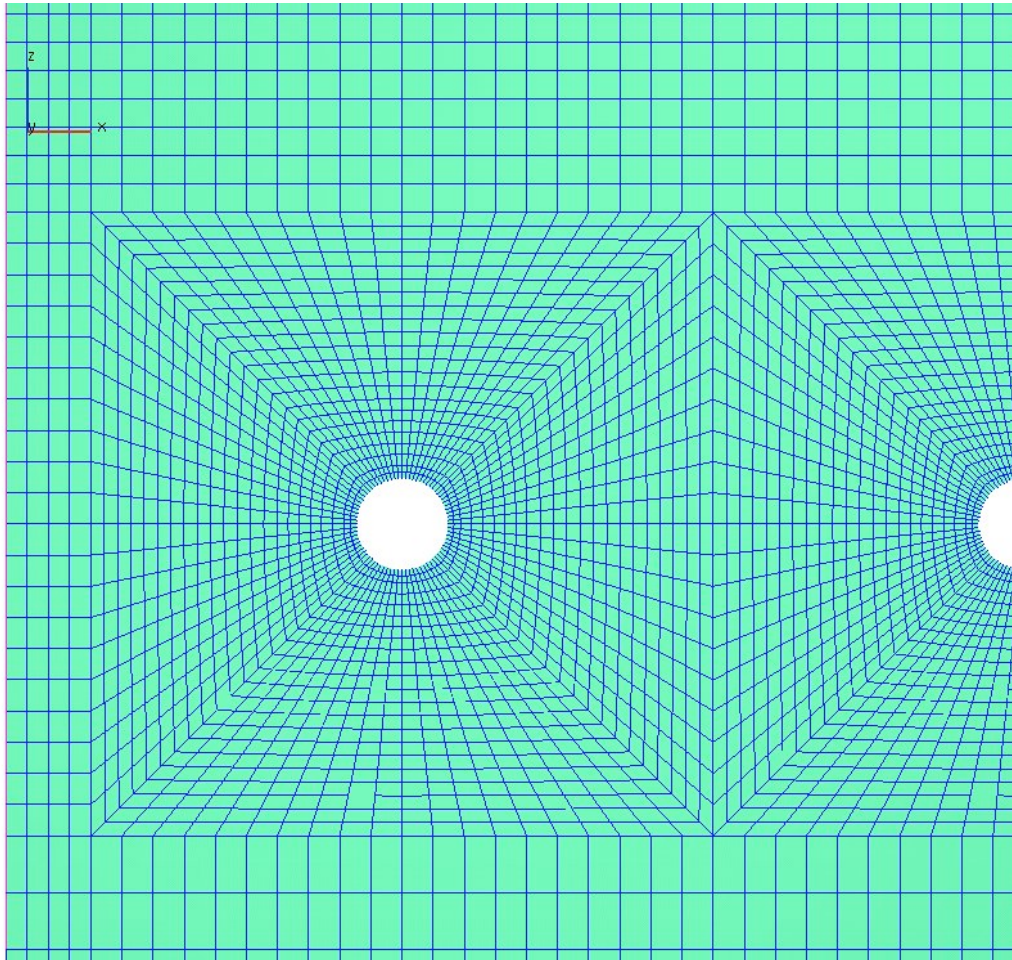


Abbildung 7.4: Detailansicht NH_3 -Eindüsung über dem Wärmetauscher

Abbildung 7.5 zeigt den mit Hilfe von CFD und dem implementierten Modul Porosity errechneten Temperaturverlauf für den gerechneten 2D-Fall. Die gewünschte Rauchgastemperatur von 440 K wird erreicht, wobei an den Rändern Abkühlung aufgrund niedriger Wandtemperatur von 273 K beobachtet werden kann.

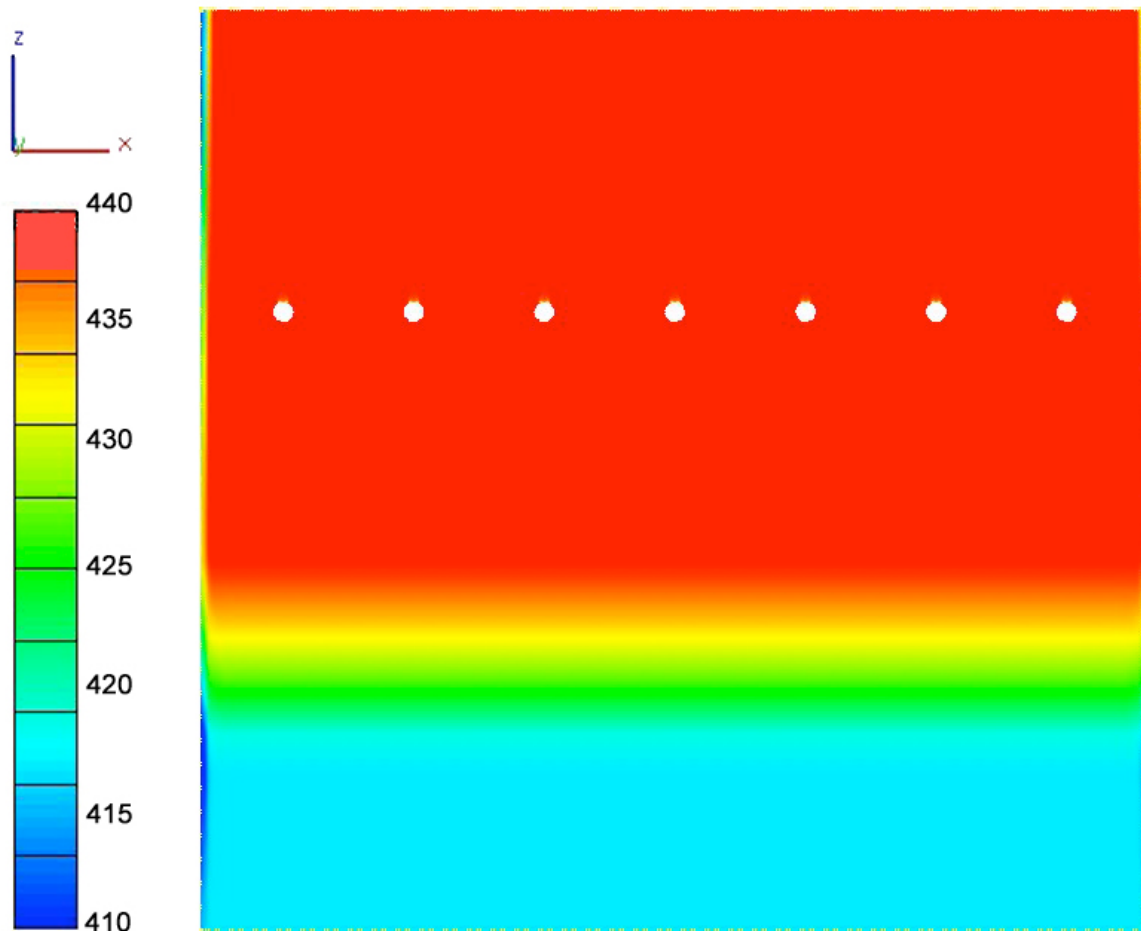


Abbildung 7.5: Temperaturverlauf im Vertikalschnitt der 2D-Wärmetauscherrechnung; Wärmetauscher als poröser Block gemäß Abbildung 7.3, Strömungsrichtung des Gases vertikal aufwärts.

7.2.2 NH₃-Eindüsung

Die Ammoniak eindüsung stellt einen wesentlichen Teil der SCR-Anlage dar. Durch eine ungleichmäßige Aufgabe von NH₃ in den Gasstrom resultieren Schief lagen im NO_x/NH₃-Verhältnis nach den Katalysatorschichten, wodurch sich Probleme mit dem NH₃-Schlupf ergeben. Zur Vereinfachung wurde bei der Simulation die Ammoniak aufgabe auf zwei nebeneinander liegende Rohre reduziert.

Das Netzgitter (Abbildung 7.6) besteht aus 668.358 Zellen in Hexaeder-Topologie. Entlang der Eindüsrichtung in einem Winkel von 45° nach unten wurden die Zellen verfeinert. Die Stromführung des Gases erfolgt von unten nach oben.

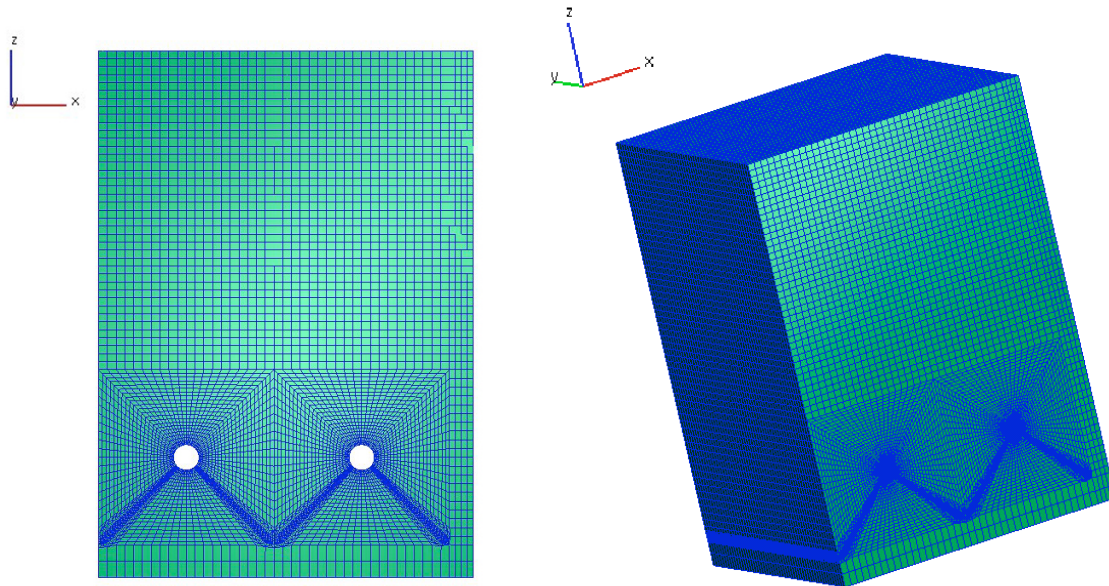


Abbildung 7.6: Netzgitter für den Berechnungsfall der NH_3 -Eindüsung

Es wurden die drei Turbulenzmodelle, $k-\varepsilon$ Modell, RSM und AVL-HTM, getestet, wobei sich bei der Rohrumströmung ohne NH_3 -Eindüsung keine signifikanten Unterschiede zeigten. Im Weiteren wurde deshalb mit dem bewährten $k-\varepsilon$ Modell gearbeitet. Weiters wurde die Rohrumströmung mit NH_3 -Eindüsung im Gegenstrom simuliert, wobei mit verschiedenen Eindüsungsgeschwindigkeiten von 20, 30 und 50 m/s gearbeitet wurde. Der Rohrdurchmesser der Eindüsungsrohre beträgt 113 mm (DN 100).

7.2.2.1 3D-Fall ohne Eindüsung – Test der verschiedenen Turbulenzmodelle

Am reduzierten System der Ammoniak-eindüsung wurden die drei verschiedenen Turbulenzmodelle, $k-\varepsilon$ Modell, RSM und AVL-HTM, getestet. Es wurde hier lediglich die Umströmung der runden Rohre betrachtet, wobei die verschiedenen Modelle keine signifikanten Unterschiede lieferten. Die Geschwindigkeit am Rohgaseinlass (unten) betrug 4 m/s.

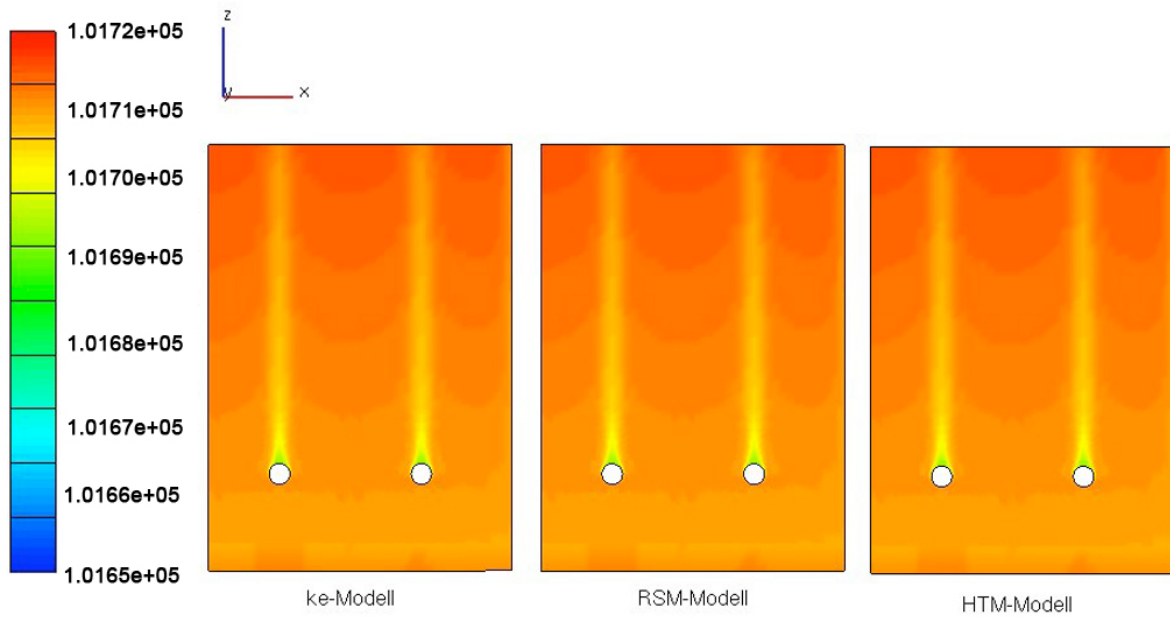


Abbildung 7.7: Totaldruck im Vertikalschnitt berechnet mit verschiedenen Turbulenzmodellen

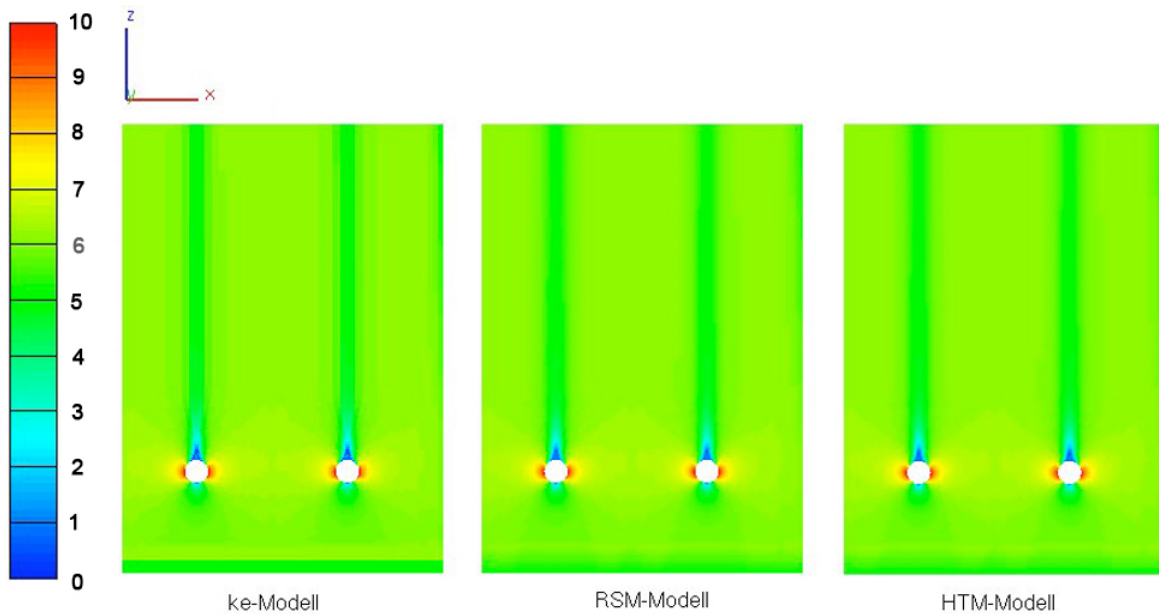


Abbildung 7.8: Geschwindigkeit im Vertikalschnitt berechnet mit verschiedenen Turbulenzmodellen

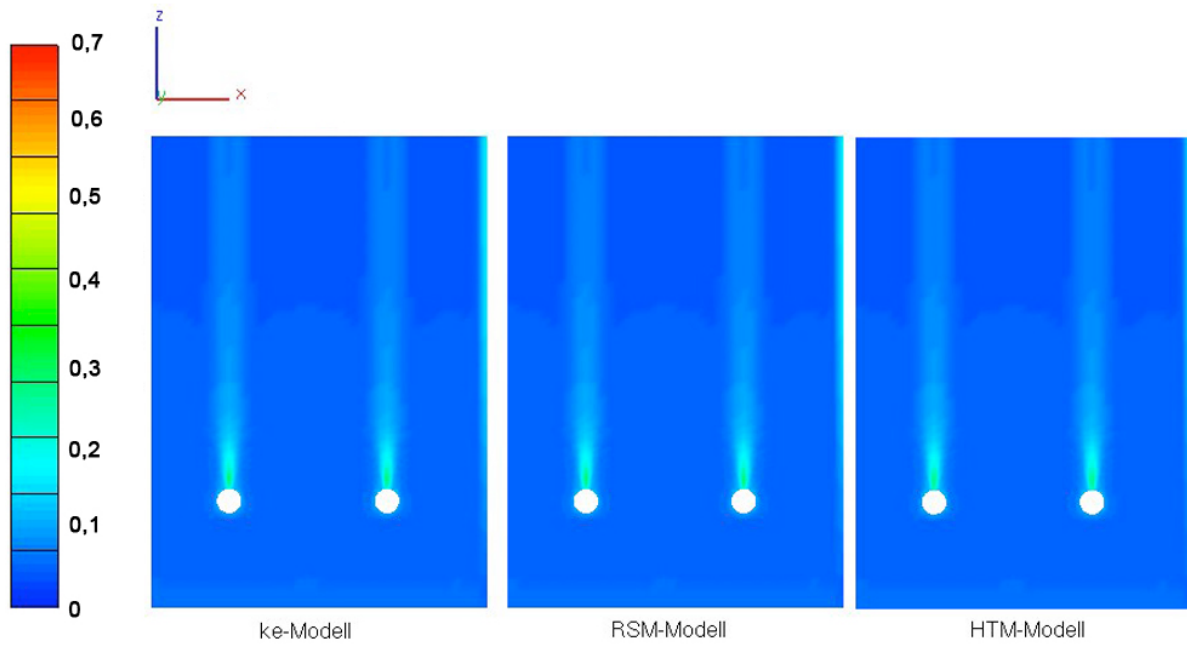


Abbildung 7.9: Turbulente kinetische Energie im Vertikalschnitt berechnet mit verschiedenen Turbulenzmodellen

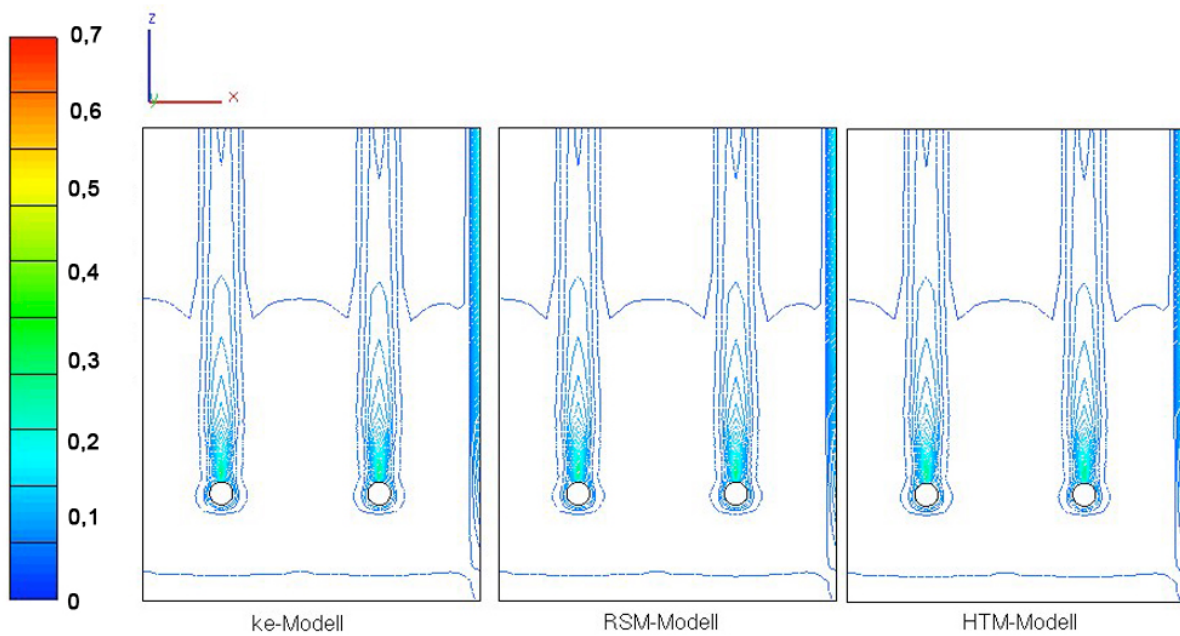


Abbildung 7.10: Turbulente kinetische Energie (Isolinien) im Vertikalschnitt berechnet mit verschiedenen Turbulenzmodellen

Die Abbildungen 7.7 bis 7.10 zeigen die errechneten Ergebnisse für Totaldruck, Geschwindigkeit und turbulente kinetische Energie bei Verwendung der verschiedenen Turbulenzmodelle.

7.2.2.2 3D-Fall mit NH₃-Eindüsung

Auch hier wird mit dem Ausschnitt der Anlage (vgl. Abbildung 7.6) gerechnet. In diesem Fall handelt es sich wieder um zwei Eindüsungsrohre mit einem Durchmesser von 113 mm (DN 100). Die NH₃-Inlets befinden sich lückenversetzt im 45°-Winkel auf den unteren zwei Seiten der Rohre, wodurch eine Ammoniakaufgabe im Gegenstrom erfolgt (vgl. Abbildung 7.11). Die Geschwindigkeit am Einlass beträgt 4 m/s, die NH₃-Eindüsungsgeschwindigkeiten werden je nach Berechnungsfall mit 20, 30 bzw. 50 m/s definiert. Der NH₃-Massestrom wird mit 0,067 kg/s angegeben.

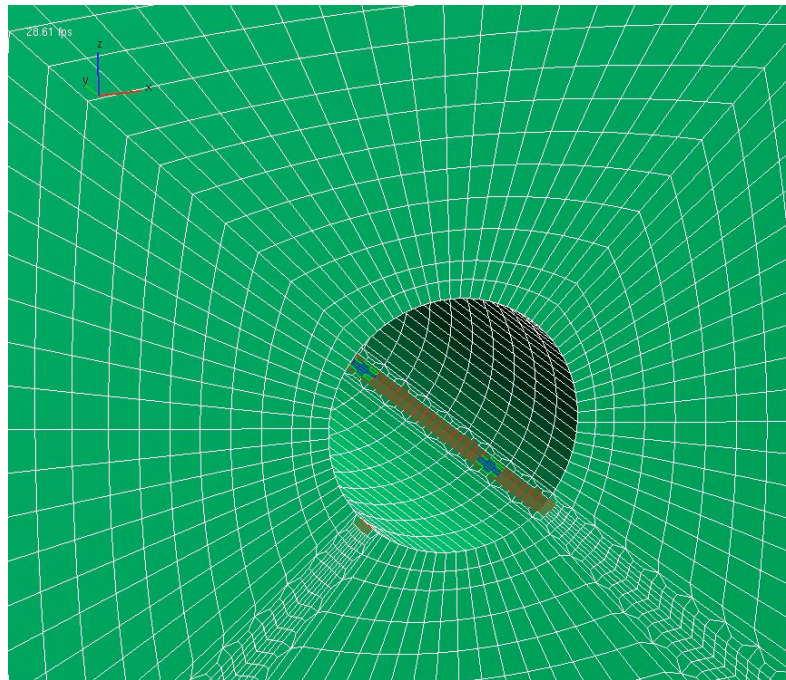


Abbildung 7.11: NH₃-Inlets im 45°-Winkel (abwärtsgerichtete Eindüsung)

Die Abbildungen 7.12 bis 7.14 zeigen die Ergebnisse der Rechnungen mit den drei verschiedenen Eindüsungsgeschwindigkeiten für Gasgeschwindigkeit und NH₃-Verteilung im Strömungsgebiet. Es ergeben sich unterschiedliche Impulse und Eindringtiefen des Gases.

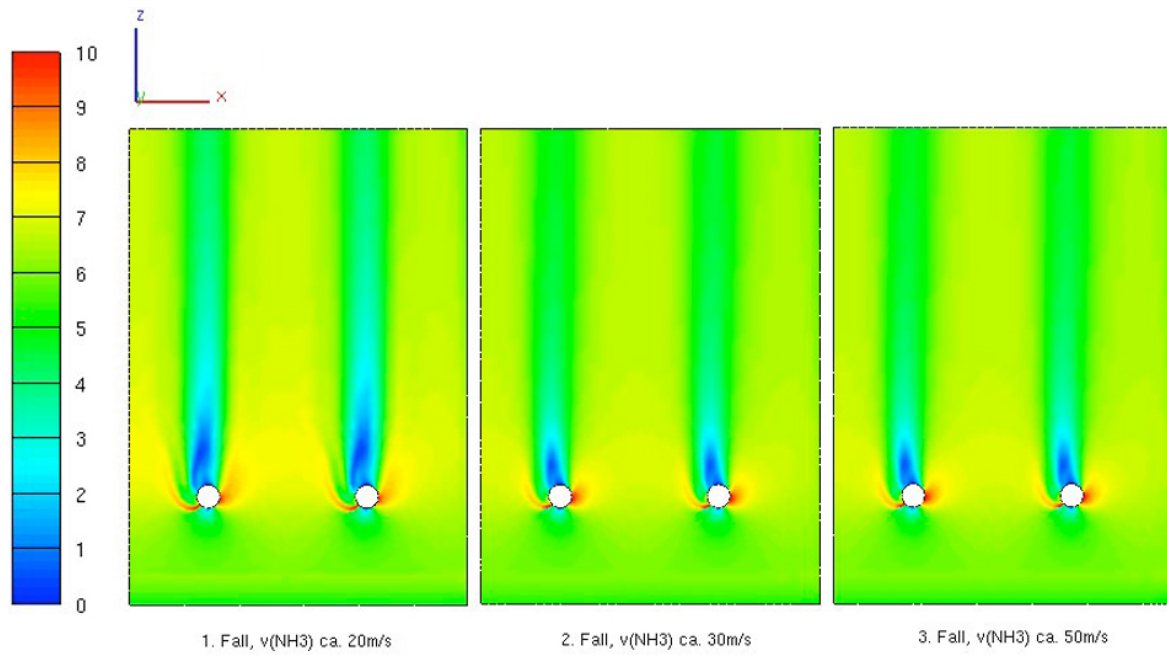


Abbildung 7.12: Gasgeschwindigkeit der Komponente NH₃ im Vertikalschnitt bei verschiedenen Eindüsungsgeschwindigkeiten

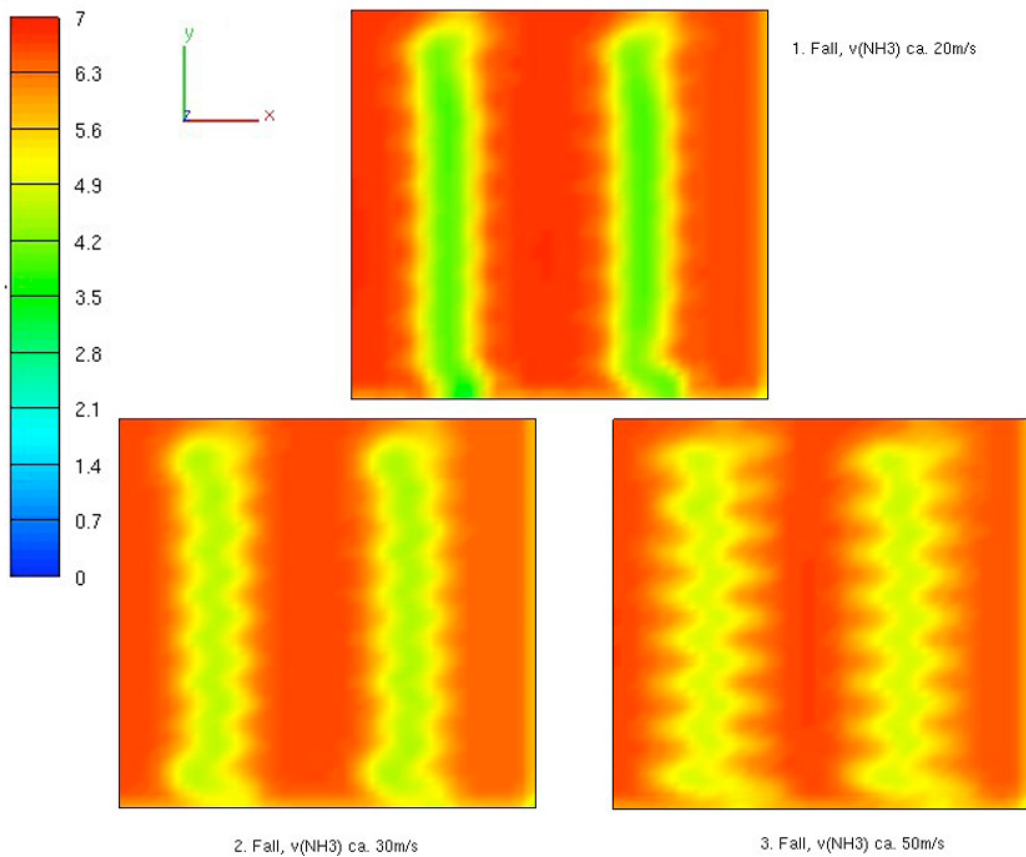


Abbildung 7.13: Gasgeschwindigkeit der Komponente NH₃ im Horizontalschnitt 1m über der NH₃-Eindüsung bei verschiedenen Eindüsungsgeschwindigkeiten

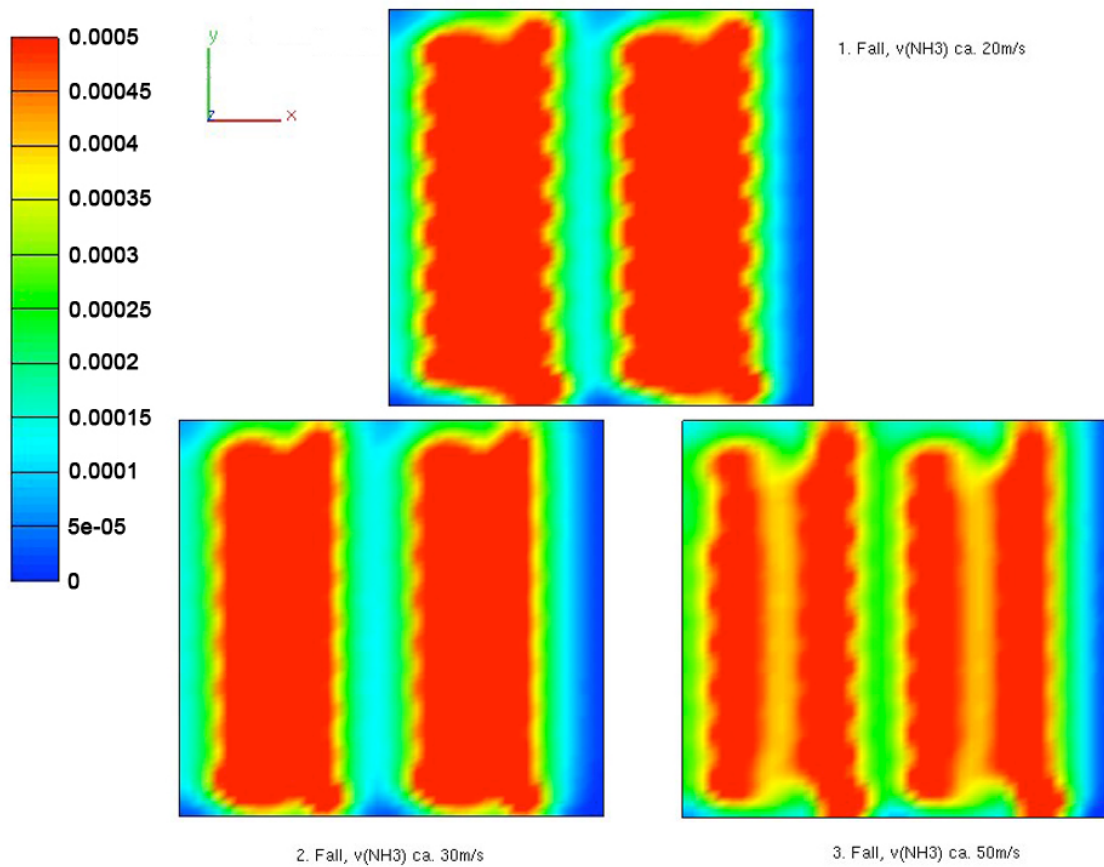
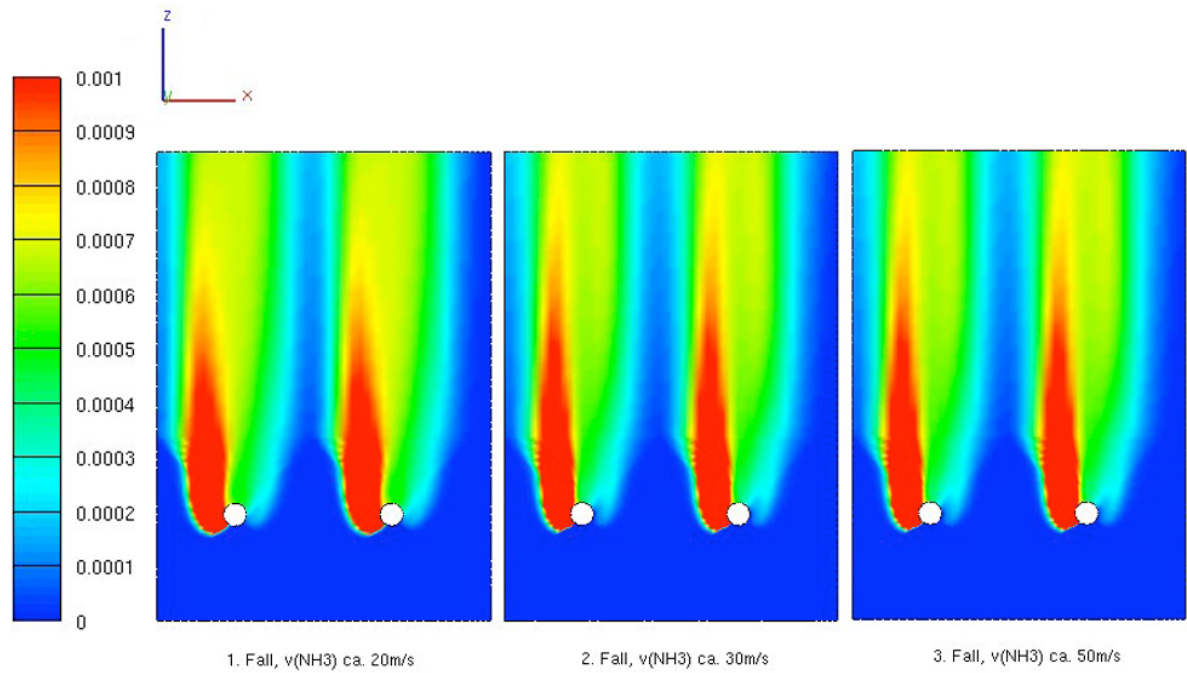


Abbildung 7.14: Passive Skalar von NH_3 [-] im Vertikal- und Horizontalschnitt (1m über der NH_3 -Eindüsung) bei verschiedenen Eindüsungsgeschwindigkeiten (Hinweis: Bei den beiden Bildern ist der Scale.)

Abbildung 7.15 zeigt einen Detailausschnitt des Gasgeschwindigkeit-Vektorfeldes im Bereich der NH_3 -Eindüsung ($v = 20 \text{ m/s}$). Hierbei wurde eine einheitliche Vektorlänge gewählt (Faktor = 0,6). Die Vektoren sind in die Strömungsebene projiziert (größter Anteil des Vektors verläuft in Projektionsfläche), da die Strömung fast zweidimensional verläuft. Die Geschwindigkeit wird nur über die Farbskalierung wiedergegeben.

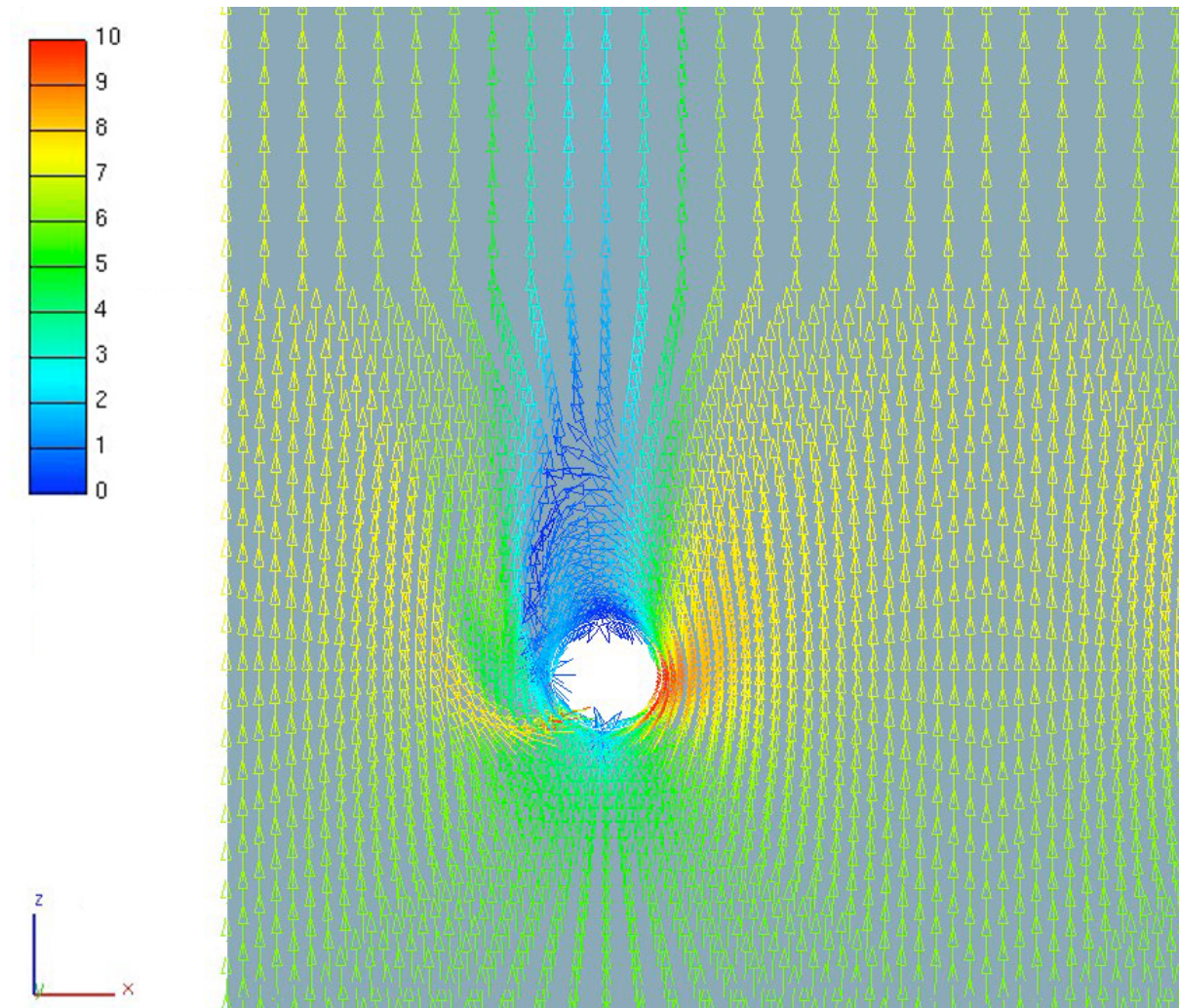


Abbildung 7.15: Detailausschnitt des Gasgeschwindigkeit-Vektorfeldes im Nahbereich eines NH_3 -Eindüsungslanzenquerschnittes (Eindüsungsgeschwindigkeit an der Bohrung $v = 20 \text{ m/s}$). Zur besseren Visualisierung wurde die Darstellung auf 0 bis 10 m/s skaliert.

Eine optimale homogene Durchmischung des Rauchgases mit Ammoniak wurde, wie die Abbildungen in diesem Kapitel zeigen mit einer Eindüsungsgeschwindigkeit an der Bohrung von 20 m/s im Gegenstrom erreicht. Wie zum Beispiel in Abbildung 7.14 im Horizontalschnitt zu sehen ist, ist dort bei einer NH_3 -Eindüsungsgeschwindigkeit von 20 m/s der Anteil der rot

gefärbten Fläche (hohe NH_3 -Konzentration) zur Gesamtfläche am größten. Bei zu hoher Eindüsungsgeschwindigkeit kommt es über den Rohren zu einer Entmischung.

7.2.3 Katalysator

Zur Berechnung der Reaktionsrate für NO im Katalysator wurde die Gleichung von Tronconi (vgl. Gleichungen 2.10 und 2.11) herangezogen. Für die Katalysatorberechnungen müssen die Abbauparameter zuerst über ein vereinfachtes numerisches Modell eines experimentell vermessenen Katalysatorprobestückes bestimmt werden. Hierfür wurden alle Katalysatordaten und Messwerte aus Laborversuchen als konstant angenommen. Einzugebende Parameter im FIRE-Modul Aftertreatment wurden angepasst, sodass die berechnete Abbaurrate mit der im Laborversuch gemessenen, von 79%, übereinstimmt.

Für die Simulation des Katalysatorblockes wurden die in Tabelle 7.4 angeführten Spezifikationen herangezogen.

Tabelle 7.4: Technische Daten des Katalysators im Laborversuch laut Aktivitätsuntersuchungen eines gebrauchten Katalysators für den Einsatz in der MVA Mainz (CPL-Bericht Nr. 12/00) als Grundlage zur Simulation des Katalysatorblocks

| Katalysatoreigenschaften und Geometrie | | |
|--|---------|------------------------|
| Waben | 4 x 4 | |
| Kante | 30 x 30 | mm |
| Zelldichte (Anzahl der Waben pro in^2) | 11 | $1/\text{in}^2$ |
| Pitch (Mitte-Mitte-Abstand von einzelnen Waben) | 7,4 | mm |
| Dichte | 450 | kg/m^3 |
| Wärmeleitfähigkeit | 0,4 | W/mK |
| Spezifische Wärme | 950 | J/kgK |
| Oberflächen/Anströmgeschwindigkeit | 12,0 | m/s |
| Volumenstrom | 1,314 | m^3/h |
| Konzentration vor dem Katalysator | | |
| H_2O | 9,9 | Vol.-% f. |
| O_2 | 1,9 | Vol.-% tr. |
| SO_2 | 200 | ppm_v tr. |
| NO | 198 | ppm_v tr. |
| NH_3 | 235 | ppm_v tr |
| Konzentration nach dem Katalysator | | |
| NO | 14 | ppm_v tr |
| NH_3 | 44 | ppm_v tr |

Zur Einbettung der Gleichungen nach Tronconi in das FIRE-Modul Aftertreatment musste folgende benutzerdefinierte Datei in die Version 8 des Programms eingebunden werden. Im neuen Release sind die Reaktionsgleichungen schon implementiert, einzige Ausnahme stellt die Reaktionsordnung für die Spezies NO und NH₃ dar, welche im Anschluss an die Reaktionsgleichung angegeben werden musste (4*NO+4*NH₃+O₂=4*N₂+6*H₂O/RO NO 1/RO NH₃ 1).

Die Datei use_catrat.f sieht wie folgt aus:

```

c=====
subroutine use_catrat (ina,ine,nbp,y,rate)
c=====
c
c   catalyst module
c   user subroutine for rate of catalytic reactions
c
c   input:
c     ina      ... start cell index
c     ine      ... end cell index
c     nbp      ... block number
c     y        ... actual species mole fractions
c              array(nsptot*nbsize)
c   return:rate(nbsize*nreakt) ... rate for reaction [kmole/m3s]
c              ... it's up to the user to check for the
c              ... correct reaction number
c
c=====
c   order of variables: (as specified in CFDWM)
c   y(1:numscl) = gas mole fraction close to surface
c   y(numscl+1:numscl+nspssto) = surface fraction stored spec
c=====
c
!-----MODULES
  use prec_mod, ONLY: prec
  use comml,    ONLY:t,p
  use catmod
  use cthmod
  include 'comdp.inc' ! for pref(mat),presin
  include 'com0.inc'
c
c-----
c   declarations
c-----
c
  dimension y (*), rate (*)
  real(prec)      rate,y
  integer nc,nl,ina,ine,nbp,i, isn,irn
c
c-----
c   local declarations
c-----
c
  real(prec)      k1,k2,k3,k4,k5,kk1,kk2,kk3,kk4
  real(prec)      greak,greak1,greak2,greak3
  real(prec)      press,r_gas,trea,denl
  mat = 1
  r_gas=8.314d0 ! [j/molk]
c----loop for relevant cells
  isn = 0
  irn = 0
  do nl = ina,ine
    nc = LC_PORO(nl)
c----calculate pressure and concentration
    press = (pref(mat)+p(nc)-presin) ! [Pa]
    denl = 1.0d-3*press/(8.3140d0*t(nc)) ![kmole/m3]
    trea = tsolid(nc)
c
c=====
c   calculate reaction rates according to chemical kinetics
c   tronconi
c   reaction 1: 4NO + 4NH3 +O2 = 4N2 + 6H2O
c   kintetic parameters used directly from spc file
c=====
c
  k1=kincof(1,1,1)*exp(-1.0*kincof(1,3,1)/(trea*r_gas))
c----rrate [kmole/m3s] if k_0 values have [kmole/m3s]
  rate(irn+1)=k1*y(1+isn)*denl
c
  isn = isn+nsptot
  irn = irn+nreakt
  end do
  return
end

```



Die Abbildung 7.16 zeigt das zweidimensionale Gitter mit 6804 Zellen der Anlage mit dem Wärmetauscher (pink), der darüberliegenden NH_3 -Eindüsung und den drei Katalysatorschichten (blau, grün, rot). Die Strömung tritt unter dem Wärmetauscher von unten nach oben ein, und verlässt den Teil der Anlage nach der dritten Katalysatorschicht.

Wie Abbildung 7.17 zeigt, kann der NO_x -Abbau in den Katalysatorblöcken dargestellt werden. In der Rechnung wurde entsprechend der Vorgabe eine NO -Abreicherung bzw. Entstickungsgrad von

$$\eta_{\text{NO}} = 79\%$$

erreicht. Probleme traten bei der Kombination der einzelnen Anlagenteile (Wärmetauscher, Ammoniakindüsung und Katalysatorblöcke) auf, da eine Kombination Wärmetauscher und Katalysator im Modul Porosity nicht möglich war. Bis zum Zeitpunkt der Fertigstellung der vorliegenden Arbeit war keine Programmverbesserung vorhanden. Im neuen Release sollen diese Probleme aber ausgeräumt worden sein.

Weitere Probleme ergaben sich im Bereich der Ammoniakindüsung, da genaue Abbildungen des Massenstroms und der Eindringtiefe des Ammoniakstrahls in das Strömungsgebiet eine wesentlich höhere Auflösung des Netzgitters voraussetzen. Eine Lösung dafür wäre eine extra Simulation der Ammoniakaufgabe (Parallelisierung) mit hoher Auflösung, wodurch man besser auf eventuelle Schief lagen im NO_x/NH_3 -Molverhältnis reagieren könnte, was wiederum zu einem gleichmäßigen Abbau in den Katalysatorschichten führen würde. Im Programm ist die Unterteilung des Strömungsgebietes mittels Parallelisierung noch nicht vorgesehen.

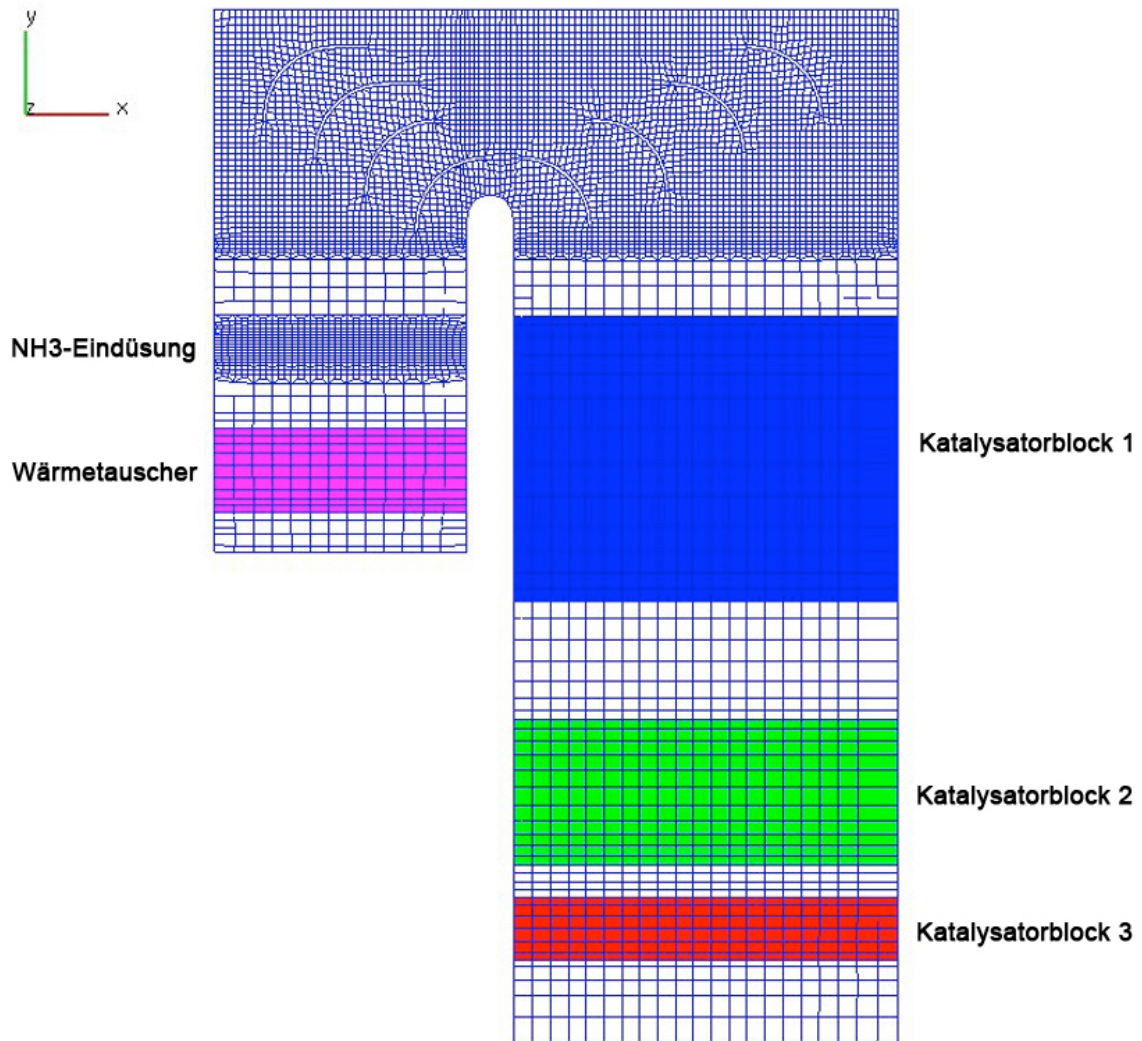


Abbildung 7.16: 2D-Mesh der Anlage inkl. Wärmetauscher, NH₃-Eindüsung und drei Katalysatorschichten

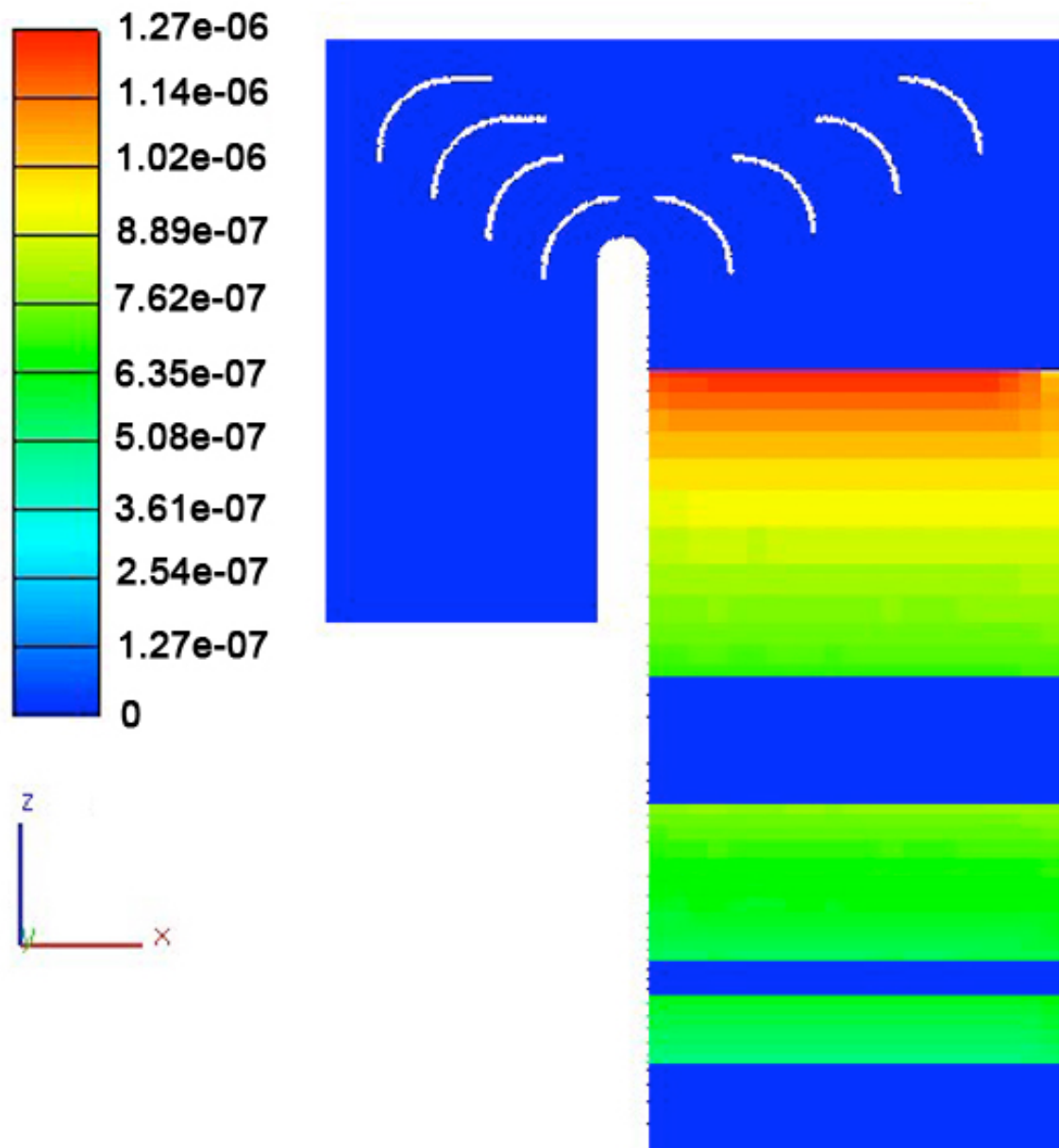


Abbildung 7.17: Cat-Rate d.h. NO-Abbau in $[\text{kmol/m}^3\text{s}]$ in 2D-Rechnung der gesamten Anlage

8 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Beschreibung von SCR-Anlagen zur Abgasentstickung mittels numerischer Strömungsmechanik (CFD) mit dem Programm SWIFT 3.1 der Firma AVL List GmbH. Die für diese Applikation wesentlichen Module (Porosität, heterogene Katalyse und Speziestransport) wurden hinsichtlich ihrer Funktion und Anwendbarkeit untersucht, woraus sich für die Kernkomponenten der SCR-Anlage folgende Ergebnisse herauskristallisierten:

Wärmetauscher:

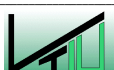
- Das Modul Porosity ist prinzipiell als Wärmetauscher-Modell einsetzbar, nur ist eine Kombination von Wärmetauscher und Katalysator im Test aufgrund von Programmproblemen nicht möglich gewesen. Eine Verbesserung, aus verfahrenstechnischer Sicht, wäre das Einbringen eines nichtlinearen Verhaltens der Temperatur aufgrund des Kontaktprinzips des Kühl- bzw. Heizmediums.

NH₃-Eindüsung:

- Mit Hilfe der CFD-Simulation kann die gleichmäßige Einbringung des NH₃-Gemisches und die gleichmäßige Anströmung des Katalysatorblockes strömungstechnisch optimiert werden, wobei für einen optimalen NO_x-Abbau auch die Einstellung des optimalen Molverhältnisses vor dem Katalysatorblock wesentlich ist. Eine zu grobe Netzgitterauflösung im Bereich der NH₃-Eindüsung stellte eine Limitierung der Simulation da. Eine mögliche Lösung dafür wäre eine extra Simulation der Ammoniakaufgabe (Parallelisierung) mit hoher Auflösung. Man könnte dadurch besser auf eventuelle Schiefenzen im NO_x/NH₃-Molverhältnis reagieren, was zu einem gleichmäßigeren Abbau in den Katalysatorschichten führen würde.
- Eine optimale Durchmischung des Rauchgases mit Ammoniak wurde mit einer Eindüsungsgeschwindigkeit von 20 m/s im Gegenstrom erreicht. Bei zu hoher Eindüsungsgeschwindigkeit kommt es über den Rohren zu einer verstärkten Strömungsseparation durch das Nachlaufgebiet der Rohre.
- Die Turbulenzmodelle k-ε, RSM und AVL HTM zeigten keinen signifikanten Unterschied in ihrer Beschreibungsqualität in Hinblick auf das Hauptströmungsfeld.

Katalysatorblock:

- Es konnte gezeigt werden, dass das Katalysator-Modul zur Beschreibung des SCR-Prozesses einsetzbar ist. Abbauraten werden plausibel wiedergegeben, eine Koppelung von chemischen Reaktionen mit der 3D-Strömung ist möglich. Ein auftretendes Problem war die zu geringe Diskretisierung im Bereich der NH₃-



Eindüsung, wodurch eine realistische Abbildung des NO_x/NH_3 -Molverhältnisses nicht möglich war.

Eine quantitative Berechnung der gesamten SCR-Anlage war noch nicht möglich. Erst mit dem neuen Softwarerelease wird eine Kombination von Wärmetauscher und Katalysator verfügbar. Auftretende Solverinstabilitäten im Programm zur Berechnung der Strömung konnten während der Entstehung der Diplomarbeit ausgeräumt werden

9 Verzeichnisse

9.1 Literatur

ABFALLVERBRENNUNG – SAMMELVERORDNUNG, (2002); Bundesgesetzblatt für die Republik Österreich, Wien

AUSTRIAN ENERGY AG, (2001); Medienspezifikation Rauchgas und Katalysator der Anlage Lauta, Graz

AVL LIST GMBH, (2000); SWIFT 3.1 User's Guide Version 7, Graz

AVL LIST GMBH, (2003); SWIFT Solver Version 3.1.1 – Theory, Graz

AVL LIST GMBH, (2003); SWIFT Version 3.1.1 - Porosity, Graz

AVL LIST GMBH, (2003); SWIFT Version 3.1.1 - Aftertreatment, Graz

AVL LIST GMBH, (2003); SWIFT Version 3.1.1 – Species Transport, Graz

FLUENT INC., (2001); FLUENT 6.0 – Users's Guide

FORCHHEIMER, T., (1901); Wasserbewegung durch Boden, Zeitschrift des Vereins deutscher Ingenieure, Jg. 45, Heft 49, S. 1736-1741 und Heft 50, S. 1781-1788

FRANK, TH., (2000); Skriptum zur Vorlesung „Methoden der numerischen Strömungsmechanik für Ein- und Mehrphasenströmung“, TU Chemnitz

GÖRNER, K., (2002); Gasreinigung und Luftreinhaltung, Springer Verlag, Berlin

MARTENS, S., (2000); Strömungsmechanik und Stoffaustausch, Unterlagen zum Seminar an der Technischen Universität Graz, Institut für Thermische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Graz

MAJEWSKI, W. A., (2002); Selective Catalytic Reduction; DieselNet Technology Guide; http://www.dieselnet.com/tech/cat_scr.html

NOLL, B., (1993); Numerische Strömungsmechanik, Springer Verlag, Berlin

OERTEL, H., (1995); Numerische Strömungsmechanik, Springer Verlag, Berlin

PRIESCHING, P., (1999); Numerical Simulation of Inhomogeneous Turbulent Combustion – Development of a Multi Species PDF Model, Dissertation TU Graz; Graz

PRINS, W. L., NUNINGA, Z. L., (1993); Design and Experience with Catalytic Reactors for SCR-DENOX, Catalysis Today, Nr. 16, S. 187-205



SCHULTES, M., (1996); Abgasreinigung: Verfahrensprinzipien, Berechnungsgrundlagen, Verfahrensvergleich, Springer Verlag, Berlin

SHAH, R.K., LONDON, A.L., (1978); Laminar Flow Forced Convection in Ducts, Academic Press, New York

STOCKER, E., LAUTENSCHLAGER, G., (1989); Großtechnische Erprobung eines mit Harnstoff arbeitenden SNCR-Verfahrens in der Kehrrichtverbrennung Basel (KVA), Müllverbrennung und Umwelt 3, Hrsg.: Thomé – Kozmiensky, K. J., EF-Verlag für Energie- und Umwelttechnik, Berlin

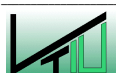
THOMÉ – KOZMIENSKY, K. J., (1994); Thermische Abfallbehandlung, EF-Verlag für Energie- und Umwelttechnik, Berlin

TRONCONI, E., FORZATTI, P., GOMEZ MARTIN, J.P., MALLOGGI, S., (1992); Selective Catalytic Removal of NO_x: A Mathematical Model for Design of Catalyst and Reactor, Chemical Engineering Science, Vol. 47, Nr. 9-11, S. 2401–2406

WEIß, C., (1995); Experimentelle Charakterisierung und numerische Simulation von dispersen Zweiphasenströmungen in gerührten Gegenstromkolonnen der Bauart RDC, Dissertation TU Graz, Graz

9.2 Abbildungen

| | |
|--|----|
| Abbildung 1.1: Kontaktreaktion am Katalysator (DENOX Katalysatoren, CERAM Porzellanfabrik Frauenthal GmbH) | 6 |
| Abbildung 2.1: High-Dust Schaltung nach Schultes, M. (1996) | 8 |
| Abbildung 2.2: Low-Dust Schaltung nach Schultes, M. (1996)..... | 8 |
| Abbildung 2.3: NO _x -Stoffumsatz in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Katalysatorwerkstoffe nach Schultes, M. (1996)..... | 10 |
| Abbildung 2.4: Katalysator in Wabenform mit Rechteckquerschnitt (DENOX Katalysatoren, CERAM Porzellanfabrik Frauenthal GmbH) | 10 |
| Abbildung 2.5: NO _x - und NH ₃ -Konzentrationsverlauf in vpm entlang mehrerer Katalysatorlagen nach Schultes, M. (1996) | 11 |
| Abbildung 2.6: Reaktionsgleichungen bei der SCR nach Majewski (2002) | 12 |
| Abbildung 2.7: Mechanismen zur Beschreibung der Reaktoroperation nach Prins et al. (1993)..... | 13 |
| Abbildung 2.8: Schema einer Reaktion am Katalysator nach Prins et al. (1993)..... | 14 |
| Abbildung 2.9: Reaktionsrate für NO nach Tronconi et al. (1992) | 15 |
| Abbildung 2.10: Dimensionslose Species-Transport-Gleichungen des SCR-Monolith-Reaktors nach Tronconi et al. (1992)..... | 16 |
| Abbildung 3.1: Bilanzelement..... | 19 |
| Abbildung 3.2: Systematisierung der Turbulenzmodelle nach Martens (2000)..... | 25 |
| Abbildung 3.3: Berechnungsschritte bei der CFD-Simulation nach Martens (2000)..... | 28 |
| Abbildung 3.4: Ablauf einer iterativen Berechnung nach AVL SWIFT Manual Teil User's Guide (2000) | 30 |
| Abbildung 6.1: Katalytische Reaktion nach AVL SWIFT Manual Teil Aftertreatment (2003). 39 | |
| Abbildung 7.1: Funktionsschema der TA Lauta (www.ravon.de) | 44 |
| Abbildung 7.2: MVA Lauta, Deutschland nach Austrian Energy (2001)..... | 45 |
| Abbildung 7.3: Netzgitter der 2D-Wärmetauscherrechnung | 50 |
| Abbildung 7.4: Detailansicht NH ₃ -Eindüsung über dem Wärmetauscher | 51 |
| Abbildung 7.5: Temperaturverlauf im Vertikalschnitt der 2D-Wärmetauscherrechnung; Wärmetauscher als poröser Block gemäß Abbildung 7.3, Strömungsrichtung des Gases vertikal aufwärts. | 52 |
| Abbildung 7.6: Netzgitter für den Berechnungsfall der NH ₃ -Eindüsung | 53 |



| | |
|--|----|
| Abbildung 7.7: Totaldruck im Vertikalschnitt berechnet mit verschiedenen Turbulenzmodellen | 54 |
| Abbildung 7.8: Geschwindigkeit im Vertikalschnitt berechnet mit verschiedenen Turbulenzmodellen | 54 |
| Abbildung 7.9: Turbulente kinetische Energie im Vertikalschnitt berechnet mit verschiedenen Turbulenzmodellen | 55 |
| Abbildung 7.10: Turbulente kinetische Energie (Isolinien) im Vertikalschnitt berechnet mit verschiedenen Turbulenzmodellen | 55 |
| Abbildung 7.11: NH ₃ -Inlets im 45°-Winkel (abwärtsgerichtete Eindüsung) | 56 |
| Abbildung 7.12: Gasgeschwindigkeit der Komponente NH ₃ im Vertikalschnitt bei verschiedenen Eindüsungsgeschwindigkeiten | 57 |
| Abbildung 7.13: Gasgeschwindigkeit der Komponente NH ₃ im Horizontalschnitt 1m über der NH ₃ -Eindüsung bei verschiedenen Eindüsungsgeschwindigkeiten | 57 |
| Abbildung 7.14: Passive Skalar von NH ₃ [-] im Vertikal- und Horizontalschnitt (1m über der NH ₃ -Eindüsung) bei verschiedenen Eindüsungsgeschwindigkeiten (Hinweis: Bei den beiden Bildern ist der Scale.) | 58 |
| Abbildung 7.15: Detailausschnitt des Gasgeschwindigkeit-Vektorfeldes im Nahbereich eines NH ₃ -Eindüsung-Lanzenquerschnittes (Eindüsungsgeschwindigkeit an der Bohrung $v = 20\text{m/s}$). Zur besseren Visualisierung wurde die Darstellung auf 0 bis 10 m/s skaliert. ... | 59 |
| Abbildung 7.16: 2D-Mesh der Anlage inkl. Wärmetauscher, NH ₃ -Eindüsung und drei Katalysatorschichten | 64 |
| Abbildung 7.17: Cat-Rate d.h. NO-Abbau in [kmol/m ³ s] in 2D-Rechnung der gesamten Anlage | 65 |

9.3 Tabellen

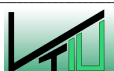
| | |
|---|------|
| Tabelle 1.1: Sekundärmaßnahmen nach Thomé-Kozmiensky (1994) | 5 |
| Tabelle 3.1: Werte für ϕ und Γ bei verschiedenen Transportvorgängen | 20 |
| Tabelle 3.2: Experimentell ermittelte Werte für Erhaltungsgleichungen nach Frank (2000) | 26 |
| Tabelle 7.1: Rauchgasstrom der SCR-Anlage Lauta | 46 |
| Tabelle 7.2: Technische Daten des Wärmetauschers der Anlage Lauta | 48 |
| Tabelle 7.3: Eingabedaten im Modul Porosity für den Wärmetauscher | 49 |
| Tabelle 7.4: Technische Daten des Katalysators im Laborversuch laut Aktivitätsuntersuchungen eines gebrauchten Katalysators für den Einsatz in der MVA Mainz (CPL-Bericht Nr. 12/00) als Grundlage zur Simulation des Katalysatorblocks | 60 |
| Tabelle 10.1: Porosity – Wärmetauscher Eingabedaten | I |
| Tabelle 10.2: Aftertreatment - Modul Porosity Eingabedaten | III |
| Tabelle 10.3: Species Transport - Transport Model Eingabedaten | IV |
| Tabelle 10.4: Species Transport - 2D-Output Eingabedaten | V |
| Tabelle 10.5: Species Transport - 3D-Output Eingabedaten | VI |
| Tabelle 10.6: General Species Transport Model - Additional Input-Data, Physical Properties Eingabedaten | VII |
| Tabelle 10.7: General Species Transport Model - Additional Input-Data, Initial Conditions Eingabedaten | VIII |
| Tabelle 10.8: Aftertreatment – Surface Species Eingabedaten | VIII |
| Tabelle 10.9: Aftertreatment - Catalyst Specification Eingabedaten | IX |
| Tabelle 10.10: Aftertreatment - Stoichiometry Specification Eingabedaten | XI |
| Tabelle 10.11: Aftertreatment - Kinetik Parameters Specification Eingabedaten | XI |
| Tabelle 10.12: Aftertreatment - Solution Specification Eingabedaten | XII |
| Tabelle 10.13: Aftertreatment - 2D-Output Eingabedaten | XIV |
| Tabelle 10.14: Aftertreatment - 3D-Output Eingabedaten | XIV |

9.4 Symbole

| | | |
|-------------------|--|--|
| a_i | Arrheniusparameter | |
| a_{mass} | spezifische Oberfläche des Katalysators | $[\text{m}^2/\text{m}^3]$ |
| A | Querschnittsfläche | $[\text{m}^2]$ |
| A_i | präexponentieller Faktor der Reaktionsrate der Reaktion i | |
| A_{tot} | gesamte Oberfläche für Wärmeübergang | $[\text{m}^2]$ |
| b_i | Arrheniusparameter | |
| c_k | Konzentration je Volumen/Fläche | $[\text{kmol}/\text{m}^3]$ oder $[\text{kmol}/\text{m}^2]$ |
| c_i | Arrheniusparameter | |
| $C_{i,b}^*$ | $= C_{i,b} / C_{\text{NO},b}^*$ dimensionslose Gaskonzentration von i im Gasbulk | |
| C_i^* | $= C_i / C_{i,b}^*$ Konzentration an der Katalysatorwand | |
| C_{NH_3} | Konzentration von NH_3 | $[\text{mol}/\text{m}^3]$ |
| C_{NO} | Konzentration von NO | $[\text{mol}/\text{m}^3]$ |
| c_p | Wärmekapazität | $[\text{J}/\text{kgK}]$ |
| Co | Courant-Zahl | |
| d | hydraulische Durchmesser eines Reaktorkanals | $[\text{m}]$ |
| | Kanaldurchmesser | $[\text{m}]$ |
| d_h | $= 4A/L_{\text{per}}$, hydraulischer Durchmesser | |
| $D_{e,k}$ | effektive intraporöse Diffusion der Spezies k | $[\text{m}^2/\text{s}]$ |
| D_k | Diffusion der Spezies k | $[\text{m}^2/\text{s}]$ |
| $D_{k,m}$ | Diffusionskoeffizient der Spezies k in Mischung | $[\text{m}^2/\text{s}]$ |
| Da_m | $= (k_c D_{e,\text{NO}})^{1/2} d / D_{\text{NO}}$, Damköhler-Zahl | |
| E_i | Aktivierungsenergie der Reaktionsrate der Reaktion i | $[\text{kJ}/\text{kmol}]$ |
| Gz_h | $= (L/d) \cdot (\alpha/d \cdot V)$ Graetz-Zahl für Wärmeübergang | |
| Gz_m | $= (m \cdot C_p) / (k \cdot L)$ Graetz-Zahl für Massentransfer | |
| H | Enthalpie | $[\text{kJ}]$ |
| i | Reaktionsindex | |
| k | turbulente kinetische Energie | $[\text{m}^3/\text{s}^2]$ |
| k | Speziesindex | |
| k_c | immanente Kinetikratenkonstante | $[\text{s}^{-1}]$ |
| k_{fi} | Reaktionsrate der Hinreaktion i | $[\text{kmol}/\text{m}^3\text{s}]$ |
| k_h | Wärmeübergangskoeffizient | $[\text{W}/\text{m}^2\text{K}]$ |
| k_m | Massentransferkoeffizient | $[\text{m}/\text{s}]$ |
| $k_{\text{mt},i}$ | Massentransferkoeffizient (gasförmig-fest) der Spezies i | $[\text{m}/\text{s}]$ |
| k_{ri} | Reaktionsrate der Rückreaktion i | $[\text{kmol}/\text{m}^3\text{s}]$ |



| | | |
|------------------|---|--------------------------|
| K | Gesamtanzahl der Spezies | |
| K_{ci} | Gleichgewichtskonstante der Reaktion i in Konzentrationseinheiten | |
| K_{gas} | Gesamtanzahl der Spezies in der Gasphase | |
| K_{pi} | Gleichgewichtskonstante der Reaktion i in Druckeinheiten | |
| K_{NH_3} | NH ₃ -Adsorptionskonstante | [m ³ /mol] |
| K_{stor} | Gesamtanzahl der Spezies im Feststoff | |
| l | Kanallänge | [m] |
| L | Länge der porösen Schicht in Fließrichtung | [m] |
| L_{per} | benetzter Umfang | [m] |
| L_{por} | integriertes Längenmaß bei Porosität | [m] |
| $m_{k,in}$ | einströmende Masse der Spezies k | [kg] |
| $m_{k,out}$ | ausströmende Masse der Spezies k | [kg] |
| M_k | Molekulargewicht der Spezies k | [kg/kmol] |
| Ma | Mach-Zahl | |
| N | Zelldichte (cpsi) | [1/in ²] |
| Nu | = $\alpha \cdot l / \lambda$ Nusselt-Zahl | |
| P | Druck | [Pa] |
| Pr | = ν / κ Prandtl-Zahl | |
| q | Reaktionsrate | [kmol/m ³ s] |
| q_i | Reaktionsrate der Spezies k | [kmol/m ³ s] |
| R | Gaskonstante | [kJ/kmolK] |
| R_{NO} | Reaktionsrate für NO | [molNO/m ³ s] |
| Re_d | = $d_h w \rho / \mu$, Reynoldszahl | |
| S_k | Entropie der Spezies k | [kJ/kmolK] |
| Sc | = ν / δ Schmidt-Zahl | |
| Sh | = $\beta \cdot l / \delta$ Sherwood-Zahl | |
| Sh_{NO} | = $k_{mt,NO} d / D_{NO}$, Sherwood-Zahl für NO | |
| t | Zeit | [s] |
| T | Temperatur | [K] |
| T_{aus} | Temperatur am Austritt | [K] |
| T_{ein} | Temperatur am Eintritt | [K] |
| T_w | Temperatur des Kühl- bzw. Heizmaterials | [K] |
| u | Geschwindigkeit | [m/s] |
| $u_{freestream}$ | Oberflächengeschwindigkeit | [m/s] |



| | | |
|-----------------|--|------------------------|
| u_{av} | durchschnittliche Flussgeschwindigkeit | [m/s] |
| u_i | Oberflächengeschwindigkeitskomponenten entlang des porösen Materials | |
| V_{tot} | gesamtes Volumen des Wärmetauschers, der Porosität | [m ³] |
| V_{Cell} | Zellvolumen | [m ³] |
| W_{Pore} | lokale Flussgeschwindigkeit | [m/s] |
| w_i | lokale Geschwindigkeitskomponenten in den Röhren ($w=u/\psi$) | [m/s] |
| X_i | Umsatz der Spezies i | |
| Z | axiale Koordinate des Reaktors | [m] |
| Z^* | $= Z D_{NO} / (u_{av} d^2)$, dimensionslose axiale Koordinate | |
| α | $= C^*_{NH_3,b} / C^*_{NO,b}$, Aufgabeverhältnis der Reaktanden | |
| α | Wärmeübergangskoeffizient | [W/m ² K] |
| α_i | Porositätsparameter | [1/m ²] |
| β | volumetrischer Wärmedurchgangskoeffizient | [W/m ² K] |
| β_i | Temperaturexponent | |
| δ | Gesamtschichtdicke des Katalysators | [m] |
| δ_{wall} | Wandstärke des Katalysators | [m] |
| δ_{WC} | Washcoat-Dicke | [m] |
| ε | Dissipationsrate | [J/s] |
| ε | Anströmfläche des Katalysators | [m ²] |
| γ_i | Assoziationskonstante der Oberflächenreaktion i | |
| κ | Permeabilität | |
| λ | Rohrreibung | |
| λ_g | thermische Leitfähigkeit des Gases | [W/mK] |
| μ | dynamische Viskosität | [Pas] |
| μ_t | turbulente Viskosität | [Pas] |
| θ | Oberflächenfraktion | |
| ρ | Dichte | [kg/m ³] |
| ψ | Porositätswert | |
| ζ | dynamischer Druckverlustkoeffizient (Zeta-Wert) | [1/m] |
| Γ_{tot} | gesamte Oberflächenkonzentration | [kmol/m ²] |
| Θ | Oberflächendichte | [kmol/m ²] |
| ΔL | Länge des porösen Materials | [m] |
| ΔL | Länge des Wärmetauschers in Strömungsrichtung | [m] |
| Δp | Druckverlust entlang des porösen Materials | [Pa] |



- am Reaktoreinlass

10 Anhang

10.1 Eingabedaten zur Berechnung des Wärmetauschers

10.1.1 Modul *Porosity*

Folgende Daten wurden im *Solver Steering File* GUI Modul *Porosity* eingegeben.

Tabelle 10.1: Porosity – Wärmetauscher Eingabedaten

| | | Eingegebene Daten zur Simulation der Anlage Lauta |
|--|---|--|
| Selection | Auswählen der getätigten <i>Cell Selection</i> für die poröse Schicht. | Waermetauscher |
| Name | Der hier eingegebene Name erscheint im Verzeichnisbaum. | Waermetauscher |
| Type | <p>Spezifikation der Art der porösen Schicht mittels Pull-Down-Menü.</p> <p>General: Druckverlust wird nach dem Forchheimermodel (vgl. Glg. 4.3) berechnet.</p> <p>Catalyst - Tube friction: Druckverlust wird aufgrund von Rohrreibung nach Gleichung 4.5 berechnet.</p> <p>Catalyst – Power law: Druckverlust wird aufgrund von Rohrreibung nach Gleichung 4.4 berechnet.</p> <p>Heat Exchanger: Es werden Wärmetauscher in Rohr- oder Plattenbauweise simuliert. Der Druckverlust wird mittels Forchheimermodel (vgl. Glg. 4.3) berechnet.</p> | Heat Exchanger |
| Converter Zeta-Value Zeta-Wert der Porosität ζ | <p>Zusammenhang zwischen dynamischen Druck und Druckverlust des porösen Materials pro Längeneinheit (vgl. Glg. 4.3)</p> $\zeta = \frac{2 \cdot \Delta p}{L \rho v^2}$ <p>Der Wert wird nicht für Porosität mit dem <i>Type Catalyst</i> verwendet.</p> | $\zeta = \frac{2 \cdot 1,5 \cdot 10^2}{0,805 \cdot 0,762 \cdot 4,168} =$ $= 28,15 \text{ [1/m]}$ |

| | | |
|---|--|---|
| Volume Fraction Volumenfraktion | Reduktion der Zellfläche senkrecht zur Richtung der Porosität. Ein Wert von 1,0 impliziert keine Veränderung, ein Wert von 0,75 reduziert die Fläche um 75%. | 0,99 |
| Turbulent Length Scale Turbulente Längeneinheit ΔL | Spezifikation des integrierten konstanten Längenmaßes der Turbulenz im Inneren der porösen Schicht. Dient der Berechnung der turbulenten Dissipationsrate (vgl. Glg. 4.10) | 0,01 [m] |
| Heat Transfer Coefficient Wärmedurchgangskoeffizient β | Spezifikation des volumetrischen Wärmedurchgangskoeffizienten für Wärmeübergang in der porösen Schicht (vgl. Glg. 4.7 und 4.9); negativer Wert bei Kühlung, positiver Wert bei Erwärmung. $\beta = \frac{\rho v c_p}{L} \cdot \ln \left(\frac{T_{\text{ein}} - T_W}{T_{\text{aus}} - T_W} \right)$ | $\beta = \frac{0,762 \cdot 4,168 \cdot 1046,70}{0,805} \cdot \ln \left(\frac{417 - 463}{448 - 463} \right) = 4628,666 \text{ [W/m}^3\text{K]}$ |
| Coolant Temperature Temperatur des Kühl- bzw. Heizmaterials T_W | Spezifikation der Heiz- bzw. Kühltemperatur, wird als konstanter Wert angenommen. | 463 [K] |
| Definition of Porosity Vector Definition des Porositätsvektors | Setzt die Richtung der Porosität fest, in die gerechnet wird. Folgendes kann gewählt werden: Manual: Strömungsrichtung wird im Fall gerichteter Strömung null gesetzt. Auto1: Für gekrümmte Porositätsblöcke; Fließrichtung wird berechnet; Wert von <i>Direction Vector</i> wird nicht berücksichtigt. Auto2: Für gerade Porositätsblöcke; Fließrichtung wird berechnet; Wert von <i>Direction Vector</i> wird nicht berücksichtigt. | Manual |
| Reverse Porosity Vector Invertierter Porositätsvektor | Ein Aktivieren der Schaltfläche bewirkt ein Drehen der berechneten Porositätsrichtung um 180°. | Off |
| Direction Vector Richtungsvektor | Eingabe der relevanten x,y,z-Werte zwischen null und eins. | 1 / 0 / 1 |
| Alpha-Value Alpha-Wert | Zusammenhang zwischen Geschwindigkeit in i-Richtung, laminarer Viskosität und dem Druckverlust pro Längeneinheit des porösen Materials. | 0 / 0 / 0 |



10.2 Eingabedaten zur Berechnung der Katalysatoren

10.2.1 Modul *Porosity*

Tabelle 10.2: Aftertreatment - Modul Porosity Eingabedaten

| | | Eingegebene Daten zur Simulation der Anlage Lauta |
|--|--|---|
| Selection | Auswählen der getätigten <i>Cell Selection</i> für die poröse Schicht. | Kat1, Kat2, Kat3 |
| Name | Der hier eingegebene Name erscheint im Verzeichnisbaum. | Kat1, Kat2, Kat3 |
| Type | Spezifikation der Art der porösen Schicht mittels Pull-Down-Menü. Catalyst – tube friction Druckverlust wird aufgrund von Rohrreibung nach Gleichung 4.4 berechnet. | Catalyst - tube friction |
| Hydraulic Diameter Hydraulischer Durchmesser d_h | Zur Kalkulation des Druckverlustes infolge von Rohrreibung. | 0,0056 [m] |
| Shape Factor Formfaktor | Formfaktor für laminare Rohrströmung, nur zur Berechnung des Druckverlustes bei <i>Type Catalyst</i> notwendig. | 1 |
| Volume Fraction Volumenfraktion | Reduktion der Zellfläche senkrecht zur Richtung der Porosität. Ein Wert von 1,0 impliziert keine Veränderung, ein Wert von 0,75 reduziert die Fläche um 75%. | 0,6 |
| Turbulent Length Scale Turbulente Längeneinheit ΔL | Spezifikation des integrierten konstanten Längenmaßes der Turbulenz im Inneren der porösen Schicht. Dient der Berechnung der turbulenten Dissipationsrate (vgl. Glg. 4.10) | 0,01 [m] |

| | | |
|--|--|-----------|
| Definition of Porosity Vector Definition des Porositätsvektors | Setzt die Richtung der Porosität fest, in die gerechnet wird. Folgendes kann gewählt werden: Manual: Strömungsrichtung wird im Fall gerichteter Strömung null gesetzt. Auto1: Für gekrümmte Porositätsblöcke; Fließrichtung wird berechnet; Wert von <i>Direction Vector</i> wird nicht berücksichtigt. Auto2: Für gerade Porositätsblöcke; Fließrichtung wird berechnet; Wert von <i>Direction Vector</i> wird nicht berücksichtigt. | Manual |
| Reverse Porosity Vector Invertierter Porositätsvektor | Ein Aktivieren der Schaltfläche bewirkt ein Drehen der berechneten Porositätsrichtung um 180°. | Off |
| Direction Vector Richtungsvektor | Eingabe der relevanten x,y,z-Werte zwischen null und eins. | 1 / 0 / 0 |

10.2.2 Modul *Species Transport*

10.2.2.1 *Transport Model*

Tabelle 10.3: *Species Transport* - *Transport Model* Eingabedaten

| | | |
|--|---|---|
| Transport model - Standard | | |
| Wird das Standard Transportmodell aktiviert, müssen erweiterte Eingabeparameter (additional input parameters) über den <i>Solver GUI</i> spezifiziert werden. | | |
| Transport model – General | | |
| Transportmodell für Katalysatorberechnungen, wobei folgende Daten eingegeben werden müssen. | | |
| Number of species mass fractions Anzahl der Spezies | Definiert die Gesamtanzahl der Spezies in der Gasphase. | 5 |

| | | |
|--|--|------------------------------|
| Do not solve equation for species number Gleichung für Speziesnummer nicht lösen | Durch Aufsummieren der Massenbrüche auf eins, kann der Rechenaufwand verringert werden, indem der Massenbruch einer Spezies nicht über ihre Transportgleichung gelöst wird. Der eingegebene Wert ist der Index der Spezies. Bei Eingabe von Null werden alle Transportgleichungen gelöst. | 0 |
| Scalar equation residual output Ausgabe der Residuen der skalaren Gleichung | Legt fest, wie oft die Residuen der skalaren Gleichung in die .fla und .flb-Dateien geschrieben werden. Bei Eingabe von Null erfolgt keine Ausgabe. | 10 |
| Edit names of species Eingabe der Stoffnamen | | |
| Names Namen | Legt die Namen der Stoffe als Strings fest. Bei Verwendung der Datenbankmethode, muss SWIFT 3.1 alle Stoffnamen in der CHEMKIN-Datenbank finden. | NO NH3 O2 H2O N2 |

10.2.2.2 2D-Output

Tabelle 10.4: Species Transport - 2D-Output Eingabedaten

| | | |
|---|---|-----|
| Mean mass fractions gemittelter Massenbruch | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe des gemittelten Massenbruches in die .fla und fl2-Dateien. | On |
| Sum of mass fractions Summe der Massenbrüche | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Summe der Massenbrüche in die .fla und fl2-Dateien. | Off |
| Mean specific heat Gemittelte spezifische Wärme | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der gemittelten spezifischen Wärme in die .fla und fl2-Dateien. | Off |
| Mean gas constant Gemittelte Gaskonstante | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der gemittelten Gaskonstante in die .fla und fl2-Dateien. | Off |

10.2.2.3 3D-Output

Tabelle 10.5: Species Transport - 3D-Output Eingabedaten

| General Information Allgemeine Informationen | | |
|---|--|-----|
| Species mass fractions Stoffmassenbrüche | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Massenbrüche der Stoffe. | On |
| Sum of species mass fraction Summe der Massenbrüche | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Summe der Massenbrüche, wobei dieser Wert der Kontrolle der Konvergenz dient, da er 1,0 sein sollte. | Off |
| Additional Information Zusätzliche Informationen | | |
| Specific heat Spezifische Wärme | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der spezifischen Wärme. | Off |
| Gas constant Gaskonstante | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Gaskonstante. | Off |
| Enthalpy Enthalpie | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Enthalpie. | Off |
| Species mole fractions Stoffmolenbruch | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Stoffmolenbrüche. | Off |
| Species diffusion coefficient Diffusionskoeffizient der Spezies | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Diffusionskoeffizienten der Stoffe. | Off |
| Thermal conductivity Thermische Leitfähigkeit | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der thermischen Leitfähigkeit. | Off |

10.2.2.4 Additional Input-Data – General Species Transport Model

Folgende Massenbrüche wurden für die einzelnen Spezies als **BC values of mass fractions** (für den Strömungsrand) eingegeben:

| | |
|------------------|-----------|
| H ₂ O | 0,0650000 |
| O ₂ | 0,0224400 |
| NO | 0,0002190 |
| NH ₃ | 0,0001475 |
| N ₂ | 0,9113000 |

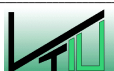


Tabelle 10.6: General Species Transport Model - Additional Input-Data, Physical Properties Eingabedaten

| | | |
|--|--|----------------------|
| Gas | Aktiviert/Deaktiviert das Fluid als Gasphase. | |
| Liquid | Aktiviert/Deaktiviert das Fluid als Flüssigphase. | |
| Density Dichte | Eingabe nur möglich wenn Gas aktiviert ist. Ideal Gas: Die Mischungsdichte wird über die Ideale Gasgleichung berechnet. Constant: Ein konstanter Wert wird für die Mischungsdichte benutzt. | |
| Molecular weight Molekulargewicht | Constant: Legt einen konstanten Wert für die ganze Mischung fest. | |
| Specific heat Spezifische Wärme | Species: Legt einen konstanten Wert für jeden Stoff in der Mischung fest. Der Wert für die Mischung wird über die CHEMKIN Mischungsregeln bestimmt. | |
| Thermal conductivity Thermische Leitfähigkeit | Database: Berechnet die physikalischen Mischungseigenschaften über die CHEMKIN-Datenbank und ihre Mischungsregeln. | |
| Diffusion coefficient Diffusionskoeffizient | | |
| Reference pressure Referenzdruck | Eingabe der Werte für Temperatur, Druck und Dichte. | [Pa] |
| Reference temperature Referenztemperatur | | [K] |
| Reference density Referenzdichte | | [kg/m ³] |
| Use database for all Datenbank für alle Werte benutzen | Bei Aktivierung werden alle physikalischen Eigenschaften über die CHEMKIN-Datenbank berechnet. | |
| Thermdat / Trandat Database Flag | | |
| Internal | SWIFT 3.1durchsucht nur die internen Datenbanken thermdat und transdat. | |
| External | SWIFT 3.1durchsucht externe Datenbanken zum Festlegen von Eigenschaften zusätzlicher Stoffe. | |
| Both | SWIFT 3.1durchsucht zuerst die interne | |



| | | |
|--|---|--|
| | und dann die externe Datenbank nach Stoffeigenschaften. | |
|--|---|--|

Im Untermenü **Solver Control** sollten folgende Änderungen vorgenommen werden:

Tabelle 10.7: General Species Transport Model - Additional Input-Data, Initial Conditions Eingabedaten

| | | |
|---|--|--|
| Equation control Gleichungs- kontrolle | Activate Equation: keine Eingabe erforderlich Underrelaxation Factors: Festlegen des Faktors der für alle Stoffe der Transportgleichung verwendet wird. | |
| Differencing scheme | Keine Eingabe erforderlich. | |
| Linear solver | Keine Eingabe erforderlich. | |
| Convergence criteria Konvergenz- kriterien | Keine Eingabe erforderlich. | |

10.2.3 Modul *Aftertreatment*

10.2.3.1 *Surface Species* - Oberflächenspezies

Tabelle 10.8: Aftertreatment – Surface Species Eingabedaten

| | | |
|--|--|---|
| Number of Surface Species Anzahl der Oberflächen- spezies | Definiert die Gesamtanzahl an Oberflächenspezies inklusive der Oberfläche. Eingabe von Null deaktiviert das <i>Surface Species</i> Model. | 0 |
| Reaction surface area Reaktionsfläche | Wert von a_{reac} zur Berechnung der Gleichung 5.2. | |
| Site density | Wert von Θ zur Berechnung der Gleichung 5.2. | |
| Edit surface species Bearbeiten der Oberflächenspezies | | |
| Names | Definiert die Namen der gespeicherten | |



| | | |
|---|---|--|
| Namen | Spezies als String-Parameter. | |
| Initial coverage fractions Ausgangsdichtebrüche | Definiert die Oberflächendichtebrüche am Beginn. Wie bei den Massenbrüchen werden alle Werte auf 1,0 aufsummiert. | |

10.2.3.2 Catalyst Specification – Katalysatorspezifikation

Tabelle 10.9: Aftertreatment - Catalyst Specification Eingabedaten

| Catalyst Specification Katalysatorspezifikation | | |
|---|---|--------------------------|
| Number of reacting catalysts Anzahl der reagierenden Katalysatoren | Cell selections: Zuweisung der jeweiligen <i>Cell selection</i> für jeden Katalysator. Inlet face selections: Zuweisung der jeweiligen Einlassebene. Outlet face selections: Zuweisung der jeweiligen Auslassebene. | |
| Index of kinetic model assigned Index des zugewiesenen kinetischen Modells | Kinetische Parameter in Anlehnung an Kapitel 5.3.3.4 Kinetic Parameters Specification. | 1 |
| Monolith initialization temperature Initialisierungstemperatur des Katalysators | Definition der Initialisierungstemperatur des Katalysators. | 593 [K] |
| Catalyst Type Art des Katalysators | | |
| Cell density (cps) Zelldichte N | Anzahl der Kanäle pro Inch ² . | 11 [1/in ²] |
| Wall thickness Wandstärke δ_{wall} | Stärke der Katalysatorwand. | 2 [m] |
| Washcoat thickness δ_{wc} | Stärke der Grundierung. | 0 [m] |
| Catalyst Physical Properties Physikalische Eigenschaften des Katalysators | | |
| Density Dichte | Dichte des Katalysatormaterials. | 450 [kg/m ³] |



| | | |
|---|--|-------------|
| Thermal conductivity Wärmeleitfähigkeit | Wärmeleitfähigkeit des Katalysatormaterials. | 0,4 [W/mK] |
| Specific heat Spezifische Wärme | Wärmekapazität des Katalysators. | 950 [J/kgK] |
| Anisotropic cond. factor | Korrigiert den Diffusionskoeffizient der Temperaturgleichung in axialer Richtung, da die Wärmeleitfähigkeit in axialer und radialer Richtung anders ist. | 0,5 |

Aus den in Tabelle 10.10 eingegebenen Daten können folgende Werte berechnet werden:

Gesamtschichtdicke des Katalysators:

$$\delta = \delta_{\text{Wall}} + 2\delta_{\text{WC}} \quad \text{Glg. 10.1}$$

Wiederholte Stärke:

$$s = \sqrt{\frac{1}{N}} \quad \text{Glg. 10.2}$$

Kanaldurchmesser des Katalysators:

$$d = s - \delta \quad \text{Glg. 10.3}$$

Anströmfläche:

$$\varepsilon = \frac{(s - \delta)^2}{s^2} \quad \text{Glg. 10.4}$$

geometrische Oberfläche:

$$a_{\text{mass}} = \frac{4(s - \delta)}{s^2} \quad \text{Glg. 10.5}$$

10.2.3.3 *Stoichiometry Specification* – Spezifikation der Stöchiometrie

Tabelle 10.10: Aftertreatment - Stoichiometry Specification Eingabedaten

| | | |
|---|--|--------------------------------------|
| Number of reactions Anzahl der Reaktionen | Eingabe der Anzahl der Reaktionen. Bei Aktivieren der Schaltfläche <i>Stoichiometry</i> können die Reaktionen eingegeben werden. | 1 4*NO+4*NH3+O2=4*N2+6*H2O |
|---|--|--------------------------------------|

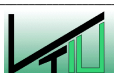
Folgende Eingabekonventionen müssen eingehalten werden, wobei SWIFT 3.1 die Massenbilanz und die Besetzung der Oberflächenelemente überprüft:

- pro Zeile eine Reaktion
- Nur Spezies verwenden, die entweder als Gasphasen- oder Oberflächenspezies definiert sind.
- Oberflächenspezies werden mit „_s“ im Anschluss an das chemische Symbol gekennzeichnet.
- Trennung von Reaktanden und Produkten mit „=“
- Trennung von Spezies mit „+“
- Trennung von Spezies und ihrem stöchiometrischen Koeffizienten mit „*“

10.2.3.4 *Kinetic Parameters Specification* – Eingabe der Kinetikparameter

Tabelle 10.11: Aftertreatment - Kinetik Parameters Specification Eingabedaten

| | | |
|--|--|---------------|
| Number of kinetic models Nummer des Kinetikmodells | Eingabe der Nummer des Kinetikmodells. Bei Selektieren von <i>Name of kinetic model</i> öffnet sich eine Tabelle. Für jede Reaktion sollten drei Flags (Aktivierungstyp, chemisches Gleichgewicht, Art des Klebkoeffizienten) und drei Parameter (Frequenzfaktor, Temperaturexponent, Aktivierungsenergie) eingegeben werden. | 1 Tronconi |
| Activation | On: Aktiviert die standardisierte Reaktionsgleichung. Off: Deaktiviert die Reaktion gänzlich. User: Benutzerdefinierte Reaktionsrate via <code>use_catrat.f</code> | User |



| | | |
|--|---|-------------------|
| Equil Gleichgewicht | Aktiviert/Deaktiviert das chemische Gleichgewicht für diese Reaktion. | Off |
| Stick | Aktiviert/Deaktiviert die Kinetikgleichung für den Klebekoeffizienten (nur für Oberflächenreaktionen) | Off |
| K_O | Frequenzfaktor für das Arrheniusgesetz. Die aktuellen Einheiten hängen von der Art der Reaktion ab. | 1000 [kmol,s,m,k] |
| Beta Temperatur- exponent β_i | Temperaturerponent für das Arrheniusgesetz. | 0 |
| E_A Aktivierungs- energie E_i | Aktivierungsenergie für das Arrheniusgesetz. | 29000 [kJ/kmol] |
| Bei Aktivierung von Use Parameter können für jede Reaktion bis zu 15 Parameter eingegeben werden. Die Parameter werden nicht direkt von SWIFT 3.1 verwendet, sondern können mit Hilfe der Datei <code>use_catrat.f</code> eingebunden werden. | | |

10.2.3.5 Solution Specification – Lösungsparameter

Tabelle 10.12: Aftertreatment - Solution Specification Eingabedaten

| Transfer coefficients | | |
|---|--|-------------|
| Type of transfer coefficients Art der Transferkoeffizienten | <p>Folgende Modelle können verwendet werden um Wärme- und Massentransferkoeffizienten zu berechnen, wobei</p> $k_h = \frac{Nu \cdot \lambda_g}{d}, \quad k_{k,m} = \frac{Sh \cdot D_{k,m}}{d}$ $Gz_h = Re \cdot Pr \cdot \frac{d}{l}, \quad Gz_m = Re \cdot Sc \cdot \frac{d}{l}$ <p>ist.</p> <p>Sieder/Tate:</p> $Nu = 1,86(Gz_h)^{1/3}$ $Sh = 1,86(Gz_m)^{1/3}$ <p>Hawthorn:</p> $Nu = 3,66 + (1 + 0,095 \cdot Gz_h)^{0,45}$ $Sh = 3,66 + (1 + 0,095 \cdot Gz_m)^{0,45}$ <p>Hansen:</p> | Sieder/Tate |

| | | |
|--|---|--------------------------|
| | $\text{Nu} = 3,66 + \frac{0,19 \cdot \text{Gz}_h^{0,8}}{1 + 0,117 \cdot \text{Gz}_h^{0,467}}$ $\text{Sh} = 3,66 + \frac{0,19 \cdot \text{Gz}_m^{0,8}}{1 + 0,117 \cdot \text{Gz}_m^{0,467}}$ <p>Constant: Konstante Werte werden verwendet.</p> <p>Wärmeübergangskoeffizient k_h [W/m²K]</p> <p>Massenübergangskoeffizient k_m [m/s]</p> <p>User: Benutzerdefinierte Korrelationen können via der Datei use_catrat.f eingegeben werden.</p> | |
| Max. heat transfer coefficient Max. Wärmeübergangskoeffizient $k_{h,max}$ | | 200 [W/m ² K] |
| Max. mass transfer coefficient Max. Massentransferkoeffizient $k_{m,max}$ | | 0,3 [m/s] |
| Reaction Solver Parameters | | |
| Solver initial step size | | 1e-07 [s] |
| Solver relative tolerance | | 1e-05 |
| Solver absolute tolerance | | 1e-08 |
| General Settings Allgemeine Einstellungen | | |
| Implicit solution of chem. kinetics Implizite Lösung der chemischen Kinetik | Normalerweise wird das Reaktionskinetik Gleichungssystem mit Beginn des Zeitschrittes gelöst (Eingabe von 0). Treten jedoch Probleme, z.B. mit dem chemischen Gleichgewicht, auf kann die Berechnung auch erst mit einer späteren Iteration begonnen werden (z.B. Eingabe von 5, Lösung bei jeder 5-ten Iteration) | 10 |
| Reaction solver block size Blockgröße des | Um den Lösungsvorgang für chemische Kinetik zu beschleunigen wird das Gleichungssystem nicht für jede einzelne | 1 |

| | | |
|---|--|----|
| Reaktionssolvers | Zelle gelöst, sondern die angegebene Anzahl von Zellen wird geblockt behandelt. | |
| Source term calculation Berechnung des Quellterms | Bei Aktivieren wird das Kinetikgleichungssystem mit den Quelltermen für Wärme und Masse gelöst. Bei Deaktivieren wird nur der Wärmeaustausch zwischen Gas und Monolith ohne chemische Reaktionen berechnet. | On |

10.2.3.6 Reaction Solver Flags

Hier können Input-Flags aktiviert bzw. deaktiviert werden, wobei die 23 Eingabefelder nur für den internen Gebrauch der AVL bestimmt sind.

10.2.3.7 2D-Output

Tabelle 10.13: Aftertreatment - 2D-Output Eingabedaten

| | | |
|--|---|----|
| Mean catalyst temperature Katalysator-temperatur | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Katalysatortemperatur in den .fla und .fl2 - Dateien | On |
| Species conversions Stoffkonvertierung | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Stoffkonvertierung in den .fla und .fl2 - Dateien, wobei die conversion für die Spezies k wie folgt berechnet wird. $X_k = 100,0 \left(1 - \frac{m_{k,out}}{m_{k,in}} \right)$ | On |

10.2.3.8 3D-Output

Tabelle 10.14: Aftertreatment - 3D-Output Eingabedaten

| Standard | | |
|---|---|----|
| Catalyst temperature Katalysator-temperatur | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Katalysatortemperatur. | On |
| Surface coverage | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe des | On |



| | | |
|--|--|----|
| <i>fraction</i> Oberflächen- dichtebruch | Oberflächendichtebruchs. | |
| <i>Extended</i> | | |
| <i>Alpha values</i> Wärmeübergangs- koeffizient | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe des Wärmeübergangskoeffizienten. | On |
| <i>Beta values</i> Massentransfer- koeffizient | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe des Massentransferkoeffizienten für jede Spezies. | On |
| <i>Reaction rates</i> Reaktionskinetik | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe Reaktionskinetik für jede Reaktion. | On |
| <i>Species reaction rates</i> Reaktionskinetik der Stoffe | Aktiviert/Deaktiviert die Ausgabe der Reaktionskinetik für jeden Stoff. | On |