

**Modellierung der Turbulenzmodulation
einer hochbeladenen reaktiven Zweiphasenströmung
am Beispiel des Zementherstellungsprozesses**

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau
der Universität Duisburg-Essen
zur Erlangung des akademischen Grades

DOKTOR-INGENIEUR

genehmigte Dissertation

von

Michael Hillers
aus
Jülich

Referent: Prof. Dr.-Ing. habil. K. Görner
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. V. Scherer

Tag der mündlichen Prüfung: 24.07.2008

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Umweltverfahrenstechnik und Anlagentechnik (LUAT) der Universität Duisburg-Essen.

Dem Lehrstuhlinhaber, Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. K. Görner, möchte ich an dieser Stelle dafür danken, dass er diese Arbeit ermöglicht und unterstützt hat.

Danken möchte ich außerdem meinen Kollegen am Lehrstuhl, die mir im Verlauf der Arbeit mit Rat und Tat zur Seite standen, und insbesondere Herrn Dr. rer. nat. K. Hübner für seine konstruktive Kritik bei der Durchsicht meiner Arbeit. Mein Dank gilt zusätzlich Herrn Dipl.-Ing. T. Bluhm-Drenhaus und Herrn Dipl.-Ing. T. Severin von der Ruhr-Universität Bochum für viele anregende Diskussionen.

Essen, Februar 2008

Michael Hillers

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Der Zementherstellungsprozess	2
1.3	Besonderheiten des Zementherstellungsprozesses	5
1.4	Ziel der vorliegenden Arbeit	5
2	Vorstellung der CFD-Prinzipien	8
2.1	Darstellungsweisen für Fluid- und Partikelphasen	8
2.1.1	Das Euler-Modell und die Navier-Stokes-Gleichungen	8
2.1.2	Das Lagrange-Modell	10
2.2	Turbulenzmodellierung	11
2.2.1	Definition der Turbulenz	11
2.2.2	Die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen	14
2.2.3	Einphasen-Turbulenzmodelle	15
2.2.3.1	Das Reynolds-Stress-Modell	15
2.2.3.2	Das k- ϵ -Modell	15
2.2.3.3	DNS und LES	16
2.3	Zweiphasen-Modellierung	17
2.3.1	Euler-Euler- und Euler-Lagrange-Ansatz	17
2.3.2	Lagrange-Betrachtung bei turbulenten Zweiphasen-Strömungen	19
2.4	Strahlungsmodellierung	22
2.4.1	Strahlungsmodelle	23
2.4.2	Bestimmung der Strahlungswerte	26
2.5	Beschreibung chemischer Reaktionen	27
2.5.1	Beschreibung der Reaktionsstöchiometrie und der Reaktions- abläufe	27
2.5.1.1	Beschreibung des Flüchtigenabbrands	28
2.5.1.2	Beschreibung des Koksabbrands und der Pyrolyse	29
2.5.2	Beschreibung der Umsatzgeschwindigkeit in der Gasphase	30
2.5.2.1	Kinetisch kontrollierte Reaktionen	31
2.5.2.2	Mischungskontrollierte Reaktionen	31
2.5.2.3	Gleichzeitig kinetisch und Mischungskontrollierte Reaktionen	34
2.5.3	Beschreibung der NO _x -Bildung	34
3	Turbulenzmodulation durch die Partikelphase	38
3.1	Definition der Turbulenzmodulation durch Partikel	38
3.2	Beschreibung der Mechanismen	38
3.3	Bedeutung für den Calcinierungsprozess	46
3.4	Untersuchungen zur Turbulenzmodulation	47
3.4.1	Vorbemerkungen	47
3.4.2	DNS- und LES-Simulationen zur Turbulenzmodulation	48
3.4.3	Laborexperimente zur Turbulenzmodulation	50
3.5	Math. Modelle zur Beschreibung mit dem k- ϵ -Modell	58
3.5.1	Quelltermmodelle	59
3.5.1.1	Modell von Mostafa, Mongia, Hamill und Malin	61
3.5.1.2	Modell von Chen, Wood, Tu und Fletcher	62
3.5.2	Viskositätsmodelle	63
3.5.2.1	Modell von Owen	64
3.5.2.2	Modell von Görner	65
3.6	Beurteilung der Modelle mittels experimenteller Daten	65
3.7	Adaption des Viskositätsmodells	72
3.8	Untersuchung des Wandeinflusses	79
3.9	Exemplarische Rechnungen für eine spezielle Calcinatorgeometrie	80

3.10	Schlussfolgerungen	82
4	CFD-Simulation des Vorcalcinierprozesses.....	84
4.1	Identifikation und Beschreibung der Einzelmechanismen	84
4.1.1	Kohleverbrennung.....	84
4.1.2	Chemische Reaktionen in der Gasphase	85
4.1.3	Calcinierung des Kalkmehlpartikels	87
4.1.4	Turbulenzmodulation.....	95
4.1.5	Wärmeübertragung durch Strahlung	95
4.2	Übersicht über Arbeiten anderer Autoren zur CFD-Simulation des Vorcalcinierprozesses.....	100
4.3	Bestimmung der Randbedingungen für die CFD-Simulation	104
4.4	CFD-Simulation des Gesamtprozesses.....	109
4.4.1	Referenzfall	109
4.4.2	Messwerte	118
4.4.3	Beurteilung des Referenzfalles	122
4.4.4	Einfluss der Turbulenzmodulations-Modelle auf den Referenzfall.....	127
4.4.5	Beschreibung des chemischen Umsatzes mit dem Vierschritt- Schema	133
5	Zusammenfassung und Ausblick.....	141
6	Literaturverzeichnis	144

Verzeichnis der Symbole und Bezeichnungen

Symbol	Größe	Einheit
a :	Absorptionskoeffizient	$\frac{1}{m}$
c :	Partikelkonzentration im Gasstrom	$\frac{kg}{m^3}$
c_i :	molare Konzentration der Spezies i	$\frac{mol}{m^3}$
c_p :	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	$\frac{J}{kg}$
d_p :	Partikeldurchmesser	m
e :	spezifische Energie	$\frac{J}{kg}$
f :	Turbulenzdämpfung	-
h :	spezifische Enthalpie	$\frac{J}{kg}$
h_G :	spezifische Gesamtenthalpie	$\frac{J}{kg}$
k :	kinetische Turbulenzenergie	$\frac{m^2}{s^2}$
$k_{f,r}$:	Vorwärtsgeschwindigkeit der r-ten Reaktion	$\frac{mol}{s}$
$k_{b,r}$:	Rückwärtsgeschwindigkeit der r-ten Reaktion	$\frac{mol}{s}$
l :	charakteristische Abmessung, Länge	m
l_K :	Kolmogorov-Längenmaß der kleinen Turbulenzwirbel	m
m :	Gasphasenbeladung mit Partikeln	$\frac{kg_{Partikel}}{kg_{Gas}}$ bzw. dimensionslos
\dot{m} :	Massenstrom	$\frac{kg}{s}$
m_p :	Partikelmasse	kg
n :	Molmenge	mol
n :	Brechungsindex	-
p :	Druck	Pa
u :	Fluidgeschwindigkeit	$\frac{m}{s}$
u_i :	Fluidgeschwindigkeit in Richtung i	$\frac{m}{s}$
u_j :	Fluidgeschwindigkeit in Richtung j	$\frac{m}{s}$

v :	Partikelgeschwindigkeit	$\frac{m}{s}$
v_i :	Partikelgeschwindigkeit in Richtung i	$\frac{m}{s}$
vpm :	Volumenanteile pro Million	-
$v'_{i,r}$:	stöchiometrischer Koeffizient der Spezies i (Edukt) in der r-ten Reaktion	-
$v''_{i,r}$:	stöchiometrischer Koeffizient der Spezies i (Produkt) in der r-ten Reaktion	-
x_i :	Ortskoordinate in Richtung i	m
x_j :	Ortskoordinate in Richtung j	m
y_i :	Molenbruch der Spezies i	-
A_q :	Partikelquerschnitt	m^2
C :	Phasenfunktion	rad
I :	Gesamt-Strahlungsintensität	$\frac{W}{m^3}$
I_t :	turbulente Intensität	%
K_a :	Absorptionskoeffizient in einer Zweiphasenströmung	$\frac{1}{m}$
K_s :	Streuungskoeffizient in einer Zweiphasenströmung	$\frac{1}{m}$
\hat{M}_i :	Molmasse	$\frac{kg}{mol}$
N_t :	Anzahldichte von Partikeln	$\frac{1}{m^3}$
Q :	relativer Wirkungsquerschnitt	-
R :	Universelle Gaskonstante; 8,314	$\frac{J}{K mol}$
\dot{R}_i :	Bildungsrate der Spezies i	$\frac{mol}{m^3 s}$
$\dot{R}_{i,r}$:	Bildungsrate der Spezies i in der r-ten Reaktion	$\frac{mol}{m^3 s}$
S_φ :	Quellterm für die Größe φ	kontextabhängig
St :	Stokes-Zahl	-
T :	Temperatur	K
Y_i :	Massenbruch der Spezies i	-
δ_{ij} :	Kronecker-Delta = $\begin{cases} 1 \text{ für } i=j \\ 0 \text{ für } i \neq j \end{cases}$	-
ε :	Dissipationsrate der kinetischen Turbulenzenergie	$\frac{m^2}{s^3}$
ε :	Emissionsverhältnis	-

η :	dynamische Viskosität	$\frac{kg}{m \cdot s}$
φ :	allgem. transportierte (skalare) Größe	kontextabhängig
μ_l :	dynamische Viskosität	$\frac{kg}{m \cdot s}$
μ_t :	turbulente Viskosität, Wirbelviskosität	$\frac{kg}{m \cdot s}$
ρ :	Dichte	$\frac{kg}{m^3}$
σ :	Stefan-Boltzmann-Konstante; $5,627 \cdot 10^{-8}$	$\frac{W}{m^2 \cdot K^4}$
σ_s :	Streuungskoeffizient	$\frac{1}{m}$
τ_e :	Wirbellebendauer	s
τ_p :	Partikelrelaxationszeit	s
τ_K :	Kolmogorov-Zeitmaß der kleinen Wirbel	s
ν :	kinematische Viskosität	$\frac{m^2}{s}$
Δh_r :	Reaktionsenthalpie einer chemischen Reaktion	$\frac{J}{kg}$ bezogen auf den maßgeblichen Reaktanden
Φ_f :	Volumenanteil der Fluidphase	-
Φ_p :	Volumenanteil der dispersen Phase	-
Γ_φ :	Austauschkoeffizient der Größe φ	$\frac{m^2}{s}$
θ_s :	Partikelkonzentration	$\frac{kg_{Partikel}}{m^3_{Dispersion}}$
∇ :	Differenzialoperator $\left(\frac{\partial}{\partial x_i} \dots \frac{\partial}{\partial x_i} \right)$	

Sub- und Superscripte

$\bar{\varphi}$:	zeitlich gemittelte Größe	
φ' :	instantane Größe	
$\hat{\varphi}$:	fluktuierender Anteil einer Größe	
$1p$:	Größe für Einphasenströmung	
$2p$:	Größe für Zweiphasenströmung	
f :	Fluid	
p :	Partikel	
RMS :	quadratischer Mittelwert	
i :	Index	
j :	Index	

1 Einleitung

1.1 Motivation

Viele Prozesse aus der Energie- und Verfahrenstechnik können mit Hilfe der numerischen Strömungssimulation (computational fluid dynamics, CFD) unter Verwendung mathematischer Modelle abgebildet und untersucht werden. Die Zahl der simulierbaren Prozesse nimmt laufend zu, da die verfügbare Rechenleistung kontinuierlich steigt und gleichzeitig die Menge der existierenden mathematischen Modelle zunimmt. Daher können auch viele komplexe großindustrielle Prozesse, die entsprechend viele Submodelle erfordern, grundsätzlich mit CFD simuliert werden. Allerdings beträgt die erforderliche Rechenzeit auch bei Einsatz von leistungsfähiger Hardware z. T. noch mehrere Wochen.

Bei einigen dieser Prozesse liegen disperse Zweiphasenströmungen vor. Teilweise treten dabei starke fluidmechanische Wechselwirkungen zwischen disperser und kontinuierlicher Phase auf, die sich gegenseitig erheblich beeinflussen und daher nicht vernachlässigt werden dürfen. Die Wechselwirkungen bestehen z. B. in einem Impulsaustausch zwischen den Phasen oder in einer Beeinflussung der Turbulenz der kontinuierlichen Phase durch die disperse Phase (Turbulenzmodulation). Turbulenzmodulation tritt bei turbulenten Zweiphasen-Strömungen dann auf, wenn der Massen- oder Volumenanteil der dispersen Phase an der Zweiphasen-Strömung ein kritisches Maß übersteigt, z. B. bei der pneumatischen Förderung, in Wirbelschichten, Zyklonen oder Blasensäulen. Ein Beispiel für einen großindustriellen Prozess, bei dem Turbulenzmodulation auftritt, ist der im Rahmen dieser Arbeit behandelte Vorcalcinierprozess der Zementindustrie.

Zement ist ein wichtiger Grundstoff des Baugewerbes. In der Bundesrepublik Deutschland wurden in den letzten Jahren durchschnittlich mehr als 30 Mio. t/a an Zement produziert. Die Zementindustrie gehört mit einem Energieverbrauch von ca. 100 Mio. GJ/a zu den energieintensivsten Branchen der deutschen Industrie. Für die Unternehmen ist daher die Schonung der Ressourcen und die Steigerung der Energieeffizienz schon aus betriebswirtschaftlichen Gründen ein wichtiges Kriterium zum Erhalt der Konkurrenzfähigkeit. Bei der Zementherstellung fällt nicht nur durch die Verbrennung von Brennstoffen CO_2 an, sondern auch durch den Calcinierprozess im Vorcalcinator, bei dem Kalkstein (CaCO_3) zu Branntkalk (CaO) umgesetzt und dabei CO_2 freigesetzt wird. Diese unvermeidbare CO_2 -Emission stellt vor dem Hintergrund des Handels mit CO_2 -Emissionszertifikaten einen erheblichen Kostenfaktor dar, dem man u. a. durch energetische Optimierung der Anlagen zu begegnen versucht. Weiterhin ist es erforderlich, die NO_x - und CO-Emissionen zu kontrollieren und unterhalb der zulässigen Grenzwerte zu halten.

Für die energetische Optimierung des Prozesses sind beim Vorcalcinator vielfach noch aufwändige Experimente und Messungen an den Produktionsanlagen erforderlich, da der Prozess der numerischen Strömungssimulation nur bedingt zugänglich ist. Der Grund hierfür ist, dass für viele Einzelvorgänge, die beim Vorcalcinierprozess auftreten, noch keine mathematischen Modelle existieren, die für eine CFD-Simulation des Prozesses geeignet sind. Die bestehenden Modelle verlangen z. T. zu viele Rechnerressourcen oder sind in ihrer Vorhersagegenauigkeit zu begrenzt. Eines dieser bislang bei CFD-Simulationen des Vorcalcinierprozesses verwendeten

Modelle mit wenig befriedigender Genauigkeit ist das Turbulenzmodell, bei dem die bereits angesprochene Turbulenzmodulation bislang nicht berücksichtigt wurde. Die Bedeutung der Turbulenzmodulation für den Vorcalcinierprozess ist zwar erkannt worden, jedoch erbrachten die bislang verfügbaren Turbulenzmodelle bezüglich der numerischen Stabilität und der Vorhersagegenauigkeit bei der CFD-Simulation des Vorcalcinierprozesses keine befriedigenden Ergebnisse.

1.2 Der Zementherstellungsprozess

Bei aktuellen Anlagen wird der Herstellungsprozess in verschiedene Einzelvorgänge aufgeteilt, die in unterschiedlichen Anlagenteilen ablaufen, nämlich Vorwärmung des Kalkmehls in einer Zyklonkaskade, Entsäuerung des Kalkmehls im Vorcalcinator, Sintern im Drehrohrföfen und Produktkühlung mit Wärmerückgewinnung im Klinkerkühler (Abbildung 1-1).

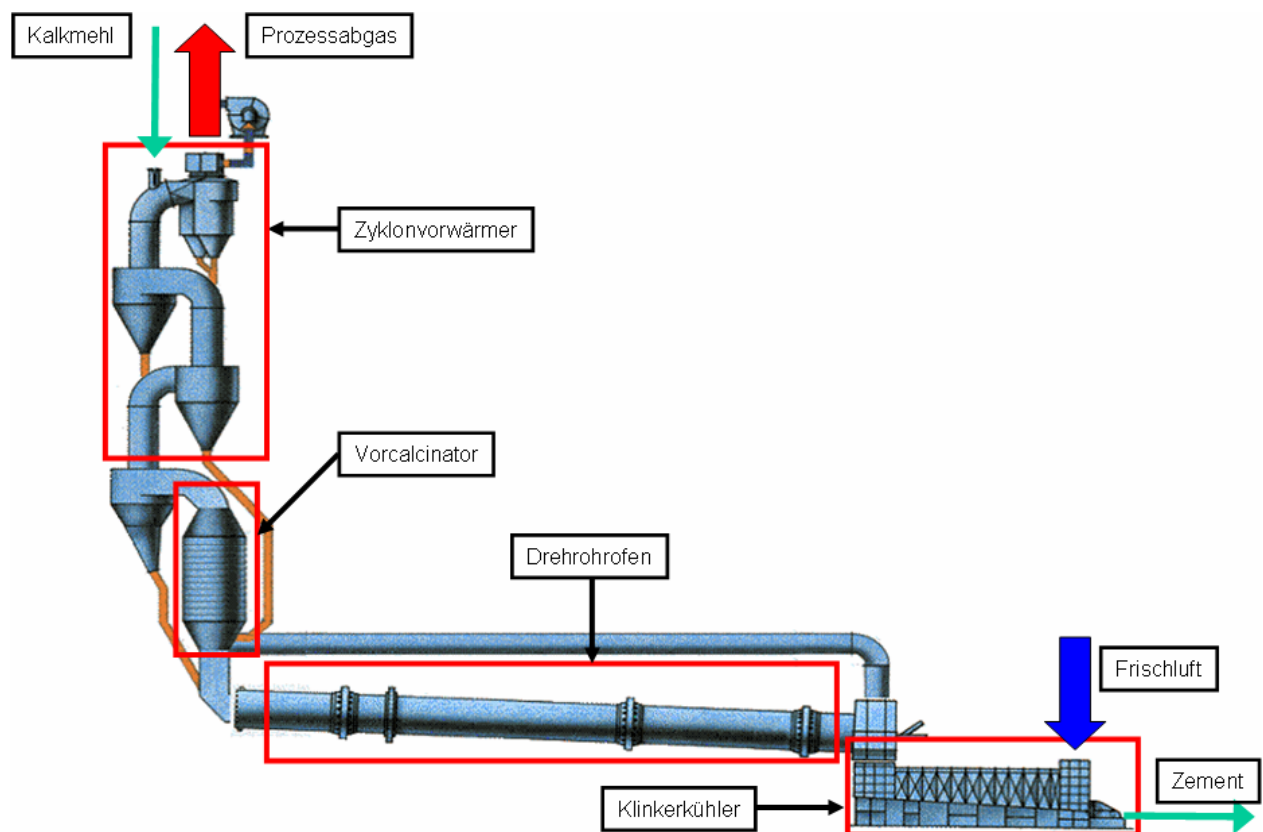
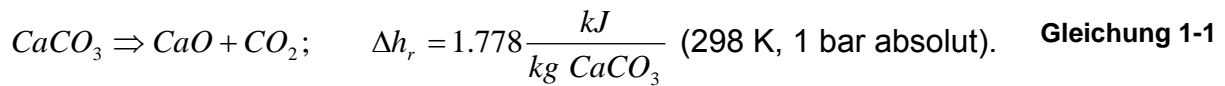


Abbildung 1-1: Schema des Zementherstellungsprozesses

Haupteinsatzstoff des Prozesses ist gemahlener Kalkstein (CaCO_3). Dieses Kalkmehl wird auf die obere Stufe der Zyklonvorwärmer-Kaskade aufgegeben. Die Zyklo- nen werden von den ca. $800\text{ }^\circ\text{C}$ heißen Prozessabgasen des Vorcalcinators durchströmt. Das Kalkmehl durchläuft die Kaskade und wird dabei erwärmt.

Bei einer Temperatur über etwa $700\text{ }^\circ\text{C}$ beginnt die endotherme Entsäuerung (Calcinierung) des Kalkmehls (CaCO_3) nach dem Reaktionsschema



Die Calcinierung des Kalkmehls beginnt in der Zyklonkaskade, mit der die thermische Energie der Prozessabgase genutzt wird. In der zweitunteren Zyklonstufe wird das Mehl vom Gasstrom getrennt. An dieser Stelle ist es bereits zu etwa 10% calciniert.

Anschließend wird das Kalkmehl dem Fuß des Vorcalcinators zugeführt. Dieser wird mit den heißen Prozessabgasen des Drehrohrofens beaufschlagt. Die heiße Gasströmung transportiert die Kalkmehlpartikel durch den Vorcalcinator zur unteren Stufe der erwähnten Zyklonkaskade, wo sie erneut vom Gasstrom abgeschieden werden.

Im Vorcalcinator findet die nahezu vollständige Calcinierung des Kalkmehls nach Gleichung 1-1 bei einer Prozesstemperatur von ca. 850 °C statt. Die erforderliche Energie wird durch Verbrennung von Kohle und in zunehmendem Maße von Sekundärbrennstoffen aufgebracht.

Nach Durchlaufen des Vorcalcinators und anschließender Abtrennung von der Gasphase in der unteren Zyklonstufe wird das Kalkmehl zusammen mit weiteren Zuschlagstoffen dem Drehrohrföfen zugeführt, in dem der Klinkerbrennprozess des Kalkmehls stattfindet.

Aufgrund der Neigung und Rotation des Drehrohres wird das Gut zum Ofenauslauf hin transportiert. Im Bereich des Ofenauslaufs werden mit dem dort installierten Brenner Gasphasentemperaturen von bis zu 2000 °C realisiert. Das Brenngut erwärmt sich dabei auf ca. 1450 °C. Nach der Bildung der gewünschten Klinkerphase in der Sinterzone - dem besonders heißen Auslaufbereich des Drehrohres - fällt der Klinker in den Kühler und wird dort von etwa 1300 °C auf unter 200 °C abgeschreckt. Die Kühlluft erwärmt sich dabei auf 700 bis 1000 °C und wird dem Prozess als Sekundär- und Tertiärluft wieder zugeführt. Wie beim Vorcalcinator kommen aus wirtschaftlichen Gründen als Brennstoffe neben den klassischen fossilen Energieträgern zunehmend Sekundär- und Abfallbrennstoffe wie Klärschlamm, Holz, Altreifen, Altöl und Kunststoffreste zum Einsatz.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Gasströmung beim Zementherstellungsprozess im Klinkerkühler beginnt, in dem die Umgebungsluft durch den heißen Klinker erwärmt wird. Diese Luft tritt anschließend in das Drehrohr ein und dient dort als Oxidationsmittel für den Verbrennungsvorgang. Das Abgas verlässt den Drehrohroföfen durch den Fuß des Vorcalcinators, durchströmt den Vorcalcinator und anschließend die Zyklonkaskade. Das Kalkmehl wird - prozesstechnisch betrachtet - im Gegenstrom zur Gasphase durch die Vorwärmerkaskade geführt, durchläuft den Vorcalcinator im Gleichstrom und anschließend das Drehrohr wieder im Gegenstrom.

Rein technisch gesehen ist der Vorcalcinator für den Zementherstellungsprozess nicht erforderlich, da die Calcinierung ebenso gut im Einlaufbereich des entsprechend länger ausgeführten Drehrohroföfens erfolgen könnte. Der Einsatz eines Vorcalcinators bringt jedoch verschiedene Vorteile mit sich: Er reduziert die erforderliche Länge des Drehrohroföfens und vermeidet dadurch den konstruktiven Aufwand, der beim Bau sehr langer Drehrohroföfen erforderlich wird (z. B. Auflagerpunkte). Hierdurch ergeben sich geringere Investitionskosten, die durch den zusätzlich erforderlichen Vorcalcinator nicht vollständig aufgezehrt werden. Ein

weiterer Vorteil des Vorcalcinator ist, dass mit seiner Hilfe die unerwünschten NO_x -Emissionen des Zementherstellungsprozesses reduziert werden können.

Die Stickoxide entstehen hauptsächlich in der heißen Brennerzone des Drehrohr-Ofens. Bei den erforderlichen Flammentemperaturen von bis zu $2000\text{ }^\circ\text{C}$ findet eine erhebliche Bildung thermischer Stickoxide statt. Der NO_x -Ausstoß eines Drehrohr-Ofens liegt bei etwa 1000 vpm (volumetric parts per million, entsprechend ca. $2100\text{ mg NO}_2/\text{m}^3\text{ i. N.}$). Im Vorcalcinator werden die stöchiometrischen Bedingungen des Brennstoffabbrands gezielt so eingestellt, dass sich sauerstoffarme Zonen bilden, in denen eine unterstöchiometrische Verbrennung stattfindet. In diesem Milieu sollen die Stickoxide zu elementarem Stickstoff reduziert werden. An die sauerstoffarme Zone schließt sich eine sauerstoffreiche Zone an, in der der Ausbrand des Brennstoffs erfolgt.

Die Bildung sauerstoffarmer bzw. -reicher Zonen im Vorcalcinator wird durch dessen bauliche Gestaltung erreicht. Die einzelnen Anlagenbauer verfolgen hier unterschiedliche Ansätze. Eine Möglichkeit ist, die Drehrohrabgase am Calcinatorfuß einzuleiten und dort gleichzeitig so viel Brennstoff zuzuführen, dass die Verbrennung unterstöchiometrisch erfolgt. Anschließend kann im mittleren Teil des Vorcalcinator die erforderliche Verbrennungsluftmenge aufgegeben werden, die den vollständigen Brennstoffausbrand sicherstellt. Diese Anlagenform ist in Abbildung 1-2 dargestellt.

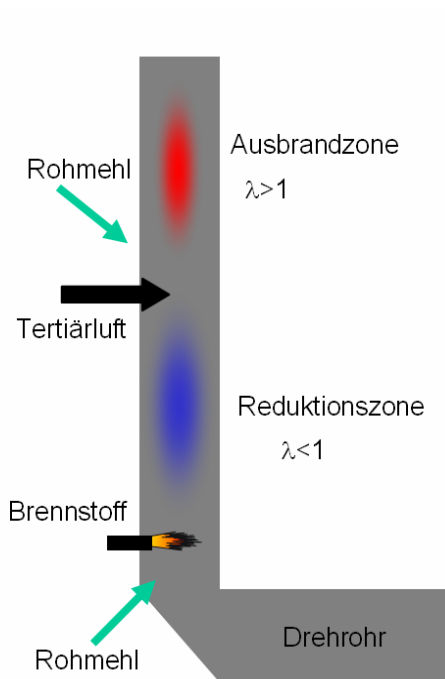


Abbildung 1-2: Einsträngiger Vorcalcinator

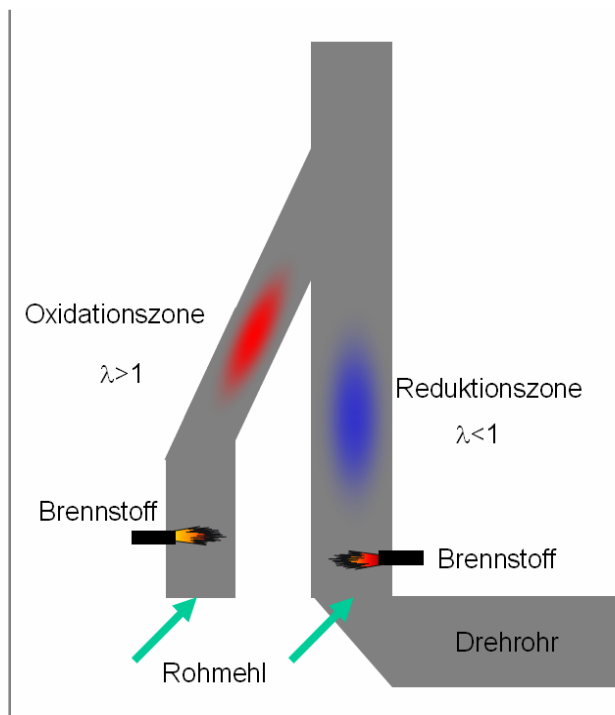


Abbildung 1-3: Zweisträngiger Vorcalcinator

Alternativ kann der Vorcalcinator zweisträngig ausgeführt werden. Dabei wird ein Strang, der Ofenstrang, mit den Drehrohrabgasen beaufschlagt und dort die unterstöchiometrische Verbrennung durchgeführt. Im parallel verlaufenden Tertiärluftstrang verläuft die Verbrennung überstöchiometrisch. Er wird mit heißer Abluft aus dem Klinkerkühler (Tertiärluft) versorgt. Anschließend werden beide Stränge zusammengeführt und die zwei so entstandenen Strähnen durch einen Drall

erzeugenden, zyklonähnlichen Apparat vermischt. So wird der Brennstoffausbrand sichergestellt (Abbildung 1-3). Bei dieser Bauform werden beide Stränge mit Kalkmehl beaufschlagt.

1.3 Besonderheiten des Zementherstellungsprozesses

Beim Zementherstellungsprozess finden viele Einzelvorgänge statt, für die bei der CFD-Simulation des Gesamtprozesses geeignete mathematische Modelle erforderlich sind:

- Brennstoffmodell: Trocknung, Pyrolyse, Koksabbrand
- Kalkmehlmodell: Calcinierung, Sulfatierung, Versinterung
- Gasphasenmodell: Flüchtigabbrand, CO-Ausbrand, NO_x-Bildung
- Strahlungsmodell: Einfluss der Partikel auf die Strahlung
- Turbulenzmodell: Einfluss der Partikel auf die Turbulenz

Diese einzelnen Vorgänge sind untereinander stark gekoppelt. Die räumliche und zeitliche Nähe von Verbrennung und Calcinierung des Kalkmehls bewirkt, dass die durch die Verbrennung freigesetzte Energie umgehend von der exothermen Calcinierungsreaktion aufgebraucht wird. Durch die hohe Beladung der Gasphase mit Feststoff (global ca. 1,5 kg Feststoff/kg Gas, lokal weitaus höher) dämpfen die Kohle- und Kalkmehlpartikel die Turbulenz der Gasphase und beeinflussen damit die Durchmischung der Gasphasenspezies, insbesondere die Durchmischung von Kohleflüchtigen, CO und Luft. Dies wirkt sich unmittelbar auf die Gasphasenchemie (Flüchtigabbrand, CO-Ausbrand, NO_x-Bildung) aus.

Darüber hinaus beeinflussen die Partikel die Wärmeübertragung durch Strahlung, da bedingt durch die hohe Partikelbeladung der Strahlung des Gaskörpers die weitaus stärkere Festkörperstrahlung überlagert ist.

1.4 Ziel der vorliegenden Arbeit

Im Rahmen dieser Arbeit wird am Beispiel des Zementherstellungsprozesses untersucht, mit welchen Modellen die von Partikeln verursachte Turbulenzmodulation einer hochbeladenen reaktiven Zweiphasenströmung in einem großindustriellen Prozess im Rahmen einer CFD-Simulation beschrieben werden kann. Dies geschieht am Beispiel eines zweisträngigen Vorcalcinators.

Die Fokussierung auf ein großindustrielles Verfahren und speziell auf den verhältnismäßig komplexen Zementherstellungsprozess stellt folgende Bedingungen an die untersuchten Turbulenzmodelle:

1. Die Vielzahl der für die CFD-Simulation solcher Prozesse benötigten Submodelle macht die Verwendung kommerzieller CFD-Codes sinnvoll, da diese gegenüber akademischen Codes meist eine größere Anzahl von Submodellen (z. B. mehrere Pyrolysemodelle, Koksabbrandmodelle, verschie-

dene Turbulenz- und Strahlungsmodelle, unterschiedliche Modelle zur Beschreibung von Gasphasenreaktionen oder Stoffwerten) beinhalten. Die hierdurch gewährleistete große Flexibilität der kommerziellen Codes ermöglicht gleichzeitig die Simulation unterschiedlichster Prozesse mit vergleichsweise geringem Aufwand.

Darüber hinaus ist die Verwendung eines kommerziellen Codes sinnvoll, weil die interessierte Industrie (Anlagenbauer, Zementwerkbetreiber, Ingenieurbüros) ebenfalls kommerzielle Codes einsetzt. Die Übernahme der entwickelten/implementierten Modelle wird so erleichtert und deren Verbreitung gefördert. Daher wurden die Simulationen im Rahmen dieser Arbeit mit dem kommerziellen CFD-Code FLUENT[®] durchgeführt und verschiedene benötigte Modelle implementiert.

2. Die Entscheidung für den Einsatz eines kommerziellen CFD-Codes verlangt, dass die behandelten Modelle über die Programmierschnittstellen des Codes in diesen eingebunden werden können.
3. Die Kopplung der im Rahmen dieser Arbeit implementierten zusätzlichen Turbulenzmodelle mit anderen Submodellen (z. B. dem turbulenzbeeinflussten Modell zur Beschreibung der chemischen Reaktionen) muss möglich sein.
4. Die starke Kopplung der in Kapitel 1.3 genannten einzelnen Vorgänge äußert sich in einem schlechten Konvergenzverhalten des zu lösenden Gleichungssystems, dem nur durch erhöhten Rechenaufwand begegnet werden kann. Durch die räumliche Größe der zu simulierenden Anlagen und die daher erforderliche hohe Anzahl von Zellen, mit denen diese Anlagen diskretisiert werden müssen, steigt der Rechenaufwand weiter an. Bei der Auswahl und Implementierung der Submodelle sollten daher nach Möglichkeit Modelle verwendet werden, die nicht zu viel Rechenzeit beanspruchen und das Konvergenzverhalten nicht weiter verschlechtern. Tabelle 1-1 gibt eine Übersicht über die für die durchgeführten Simulationen erforderliche Hard- und Software sowie über den Rechenaufwand.
5. Die getrennte Validierung einzelner Submodelle des Prozesses mittels experimenteller Daten aus Anlagen im industriellen Maßstab ist nicht möglich, da viele der hierfür erforderlichen Daten (z. B. Turbulenzverhältnisse im Vorcalcinator) messtechnisch nicht zugänglich sind. Die Validierung der Modelle muss daher mit Ergebnissen aus Laboranlagen möglich sein.

Plattform:	Linux-Cluster aus 8 Einzelrechnern mit 64-bit-Prozessoren; 3,4 GHz Taktfrequenz; 4 GB RAM pro Maschine
Betriebssystem:	Suse Linux 9.3, 64-bit-Version
CFD-Code:	FLUENT [®] Versionen 6.1 bis 6.3
Zellenanzahl:	ca. 1.000.000
Rechenzeit:	3 bis 4 Wochen pro Simulation

Tabelle 1-1: Hardware, Software und Rechenaufwand für die durchgeführten CFD-Simulationen

Hauptgegenstand der vorliegenden Arbeit ist die Modellierung der Turbulenzmodulation einer hochbeladenen reaktiven Zweiphasenströmung mit einem kommerziellen CFD-Code unter den beschriebenen Randbedingungen. Die Modellierung wird beispielhaft an dem beschriebenen Vorcalcinierprozess der Zementindustrie durchgeführt. Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Untersuchung der Eignung der vorgestellten Modelle zur Turbulenzmodulation unter den Aspekten

- Genauigkeit,
- Rechenaufwand und
- numerische Stabilität.

2 Vorstellung der CFD-Prinzipien

Die mathematischen Grundlagen der CFD-Simulation sind in der Literatur umfassend dargestellt (z. B. in [Görne91.01]) und werden daher hier nur stark verkürzt wiedergegeben.

Bei der CFD-Simulation wird das interessierende Rechengebiet (d. h. der betrachtete Apparat oder Anlagenteil) zerlegt in diskrete Volumenelemente, sog. Zellen (Abbildung 2-1). Eine größere Auflösung, d. h. eine Erhöhung der Zellenzahl, verbessert die Genauigkeit, lässt aber den erforderlichen Rechenaufwand steigen. Die Vorgänge in den einzelnen Zellen (z. B. Fluidströmung, Partikelbewegung) werden mit mathematischen Modellen beschrieben. Diese Modelle basieren auf dem Umstand, dass die betrachteten Größen (z. B. Masse, Energie, Impuls) erhalten bleiben und somit bilanziert werden können.

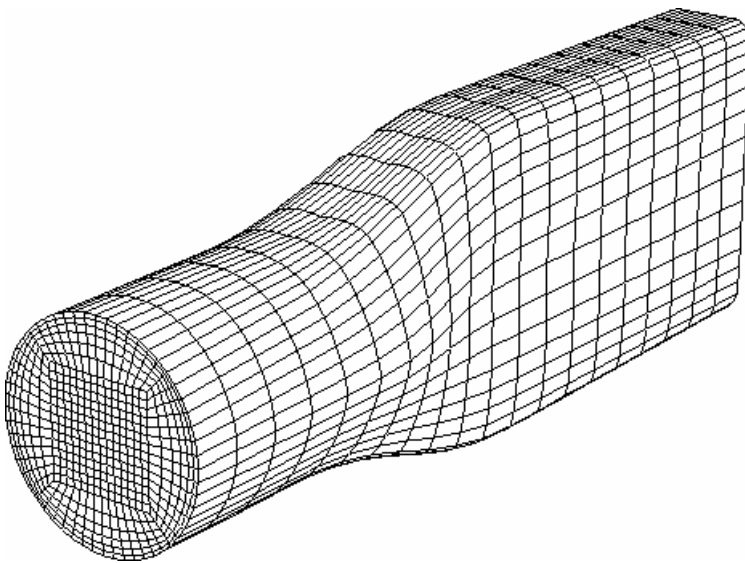


Abbildung 2-1: Diskretisierung einer Geometrie mit Zellen

Die Betrachtung dieser Vorgänge kann sowohl mit dem Euler-Modell (Kapitel 2.1.1) als auch mit dem Lagrange-Modell (Kapitel 2.1.2) erfolgen.

2.1 Darstellungsweisen für Fluid- und Partikelphasen

2.1.1 Das Euler-Modell und die Navier-Stokes-Gleichungen

Grundlage der Euler'schen Betrachtungsweise ist die allgemeine Transportgleichung für die skalare Größe φ , die z. B. für die Geschwindigkeit, die Enthalpie oder den Massenbruch einer Fluidkomponente stehen kann. Diese differenzielle Bilanzgleichung lautet in kartesischen Koordinaten:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varphi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varphi) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x_j}) + S_\varphi \quad \text{Gleichung 2-1}$$

zeitliche Änderung konvektiver Transport diffusiver Transport Quellen + Senken

mit

- ρ : Fluiddichte [kg/m³]
- φ : allgemeine transportierte Größe, Einheit kontextabhängig
- u_j : Fluidgeschwindigkeit in Raumrichtung x_j [m/s]
- x_j : Raumrichtung [m]
- Γ_φ : Austauschkoefizient [m²/s]
- S_φ : Quellterm für die Größe φ , Einheit kontextabhängig

Bei der hier gewählten Form der Gleichung ist die Variable φ eine spezifische, d. h. massenbezogene Größe. Wird für φ eine der nachfolgend tabellierten spezifischen Größen eingesetzt, so ergibt sich die zugehörige Bilanz (Tabelle 2-1).

Größe für φ	beschriebene transportierte Größe	Bezeichnung der Gleichung
1	spezifische Masse	Kontinuitätsgleichung
u_j	spezifischer Impuls in Richtung j	Impulsgleichung
h	spezifische Enthalpie	Energiegleichung
y_i	Massenbruch der Spezies i	Bilanzgleichung der Spezies i

Tabelle 2-1: Transportierte Größen in der allgemeinen Bilanzgleichung

Für jedes Volumenelement wird im Rahmen der Berechnung die allgemeine Transportgleichung der für die Berechnung interessierenden Variablen (z. B. Enthalpie, Impuls in die Raumrichtungen, Massenbruch der Spezies im Fluid) gelöst.

Bei dieser Darstellung wird das betrachtete Medium als Kontinuum angesehen, über das in einem ortsfesten Kontrollvolumen, der Zelle, bilanziert wird (Abbildung 2-2). Diese Betrachtungsweise ist zulässig, wenn die makroskopischen Eigenschaften der Phase (z. B. ihre Dichte) mit einer makroskopisch stetigen Funktion beschrieben werden können. Ein Vorteil dieser makroskopischen Betrachtungsweise ist, dass bei einer Fluidströmung kein sehr großes Molekülkollektiv betrachtet werden muss, sondern dass das Fluid mit wenigen Parametern (z. B. Dichte, Geschwindigkeit in die Raumrichtungen) beschrieben werden kann. Daher werden Fluide meist in der Euler-Darstellung betrachtet.

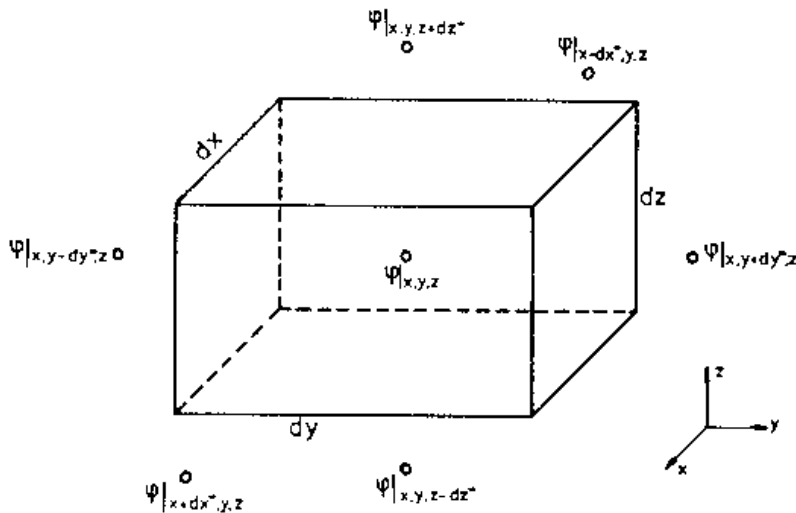


Abbildung 2-2: Kontrollvolumen in der Euler-Darstellung

Eine der Größen, die bei strömenden Fluiden stets erhalten bleibt, ist der Impuls. Die Impulsbilanz lässt sich in der Euler-Darstellung formal herleiten, indem in die allgemeine Transportgleichung (Gleichung 2-1) für die allgemeine Variable φ die Geschwindigkeit u_j in die Raumrichtung j eingesetzt wird. Die Geschwindigkeit kann dabei als spezifischer Impuls des Fluids interpretiert werden.

Für die Raumrichtung j lautet die Impulsbilanz damit:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\Gamma_{u_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_j}) + S_{u_j} \quad \text{Gleichung 2-2}$$

zeitliche Änderung	konvektiver Transport	diffusiver Transport	Quellen + Senken
-----------------------	--------------------------	-------------------------	---------------------

Diese Impulsbilanz wird als Navier-Stokes-Gleichung bezeichnet. Sie gilt sinngemäß in alle Raumrichtungen. Schwierigkeiten bereitet bei turbulenten Strömungen die Modellierung des Diffusionsterms, in dem nicht nur die laminare, sondern auch die durch Turbulenz hervorgerufene Diffusion enthalten ist, was eine Reynolds-Mittelung erfordert. Hierauf wird in Kapitel 2.2.2 eingegangen.

2.1.2 Das Lagrange-Modell

Bei der Lagrange-Darstellung (Abbildung 2-3) wird - anders als bei der Euler-Darstellung - die Flugbahn einzelner Objekte (in der Regel Partikel) in einem mitbewegten Koordinatensystem beschrieben. Bei dieser mikroskopischen Betrachtung ergibt sich die Bewegungsgleichung aus der Lösung des Impulssatzes für das Partikel. Dieser lautet:

$$\frac{d}{dt}(m_p v_j) = \sum F_i$$

Gleichung 2-3

mit

- m_p : Partikelmasse [kg]
 v_j : Partikelgeschwindigkeit in Raumrichtung j [m/s]
 F_i : am Partikel angreifende Kraft [N]

In dem Ausdruck $\sum F_i$ sind dabei sämtliche an das Partikel angreifenden äußeren Kräfte zusammengefasst. Zu diesen gehören

- die Schlepp- und Widerstandskräfte, die zwischen Partikel und umgebenden Fluid auftreten,
- die Gewichtskraft und
- evtl. weitere Kräfte wie elektromagnetische Kraft, virtuelle Massenkraft oder eine Kraft aufgrund eines Druckgradienten am Partikel.

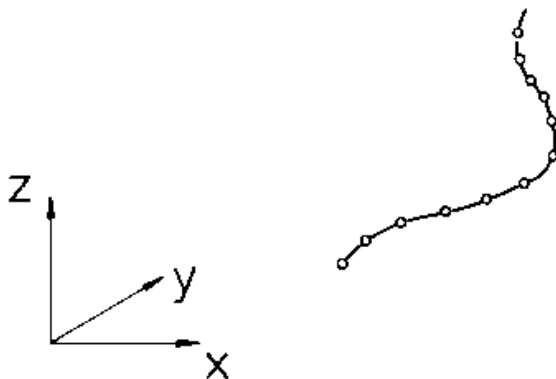


Abbildung 2-3: Lagrange-Betrachtung eines Partikels

Durch diese gezielte Betrachtung einzelner Partikel können Vorgänge an Partikeln (z. B. Kohleabbrand oder Umsatz des Kalkmehls beim Vorcalcinerprozess) leicht mathematisch beschrieben und bilanziert werden.

2.2 Turbulenzmodellierung

2.2.1 Definition der Turbulenz

Die Turbulenz wurde von O. Reynolds 1883 nachgewiesen, indem er einer in einem Rohr kontinuierlich fließenden Wasserströmung durch ein dünnes Röhrchen eine farbige Flüssigkeit zuführte. Bei hinreichend geringer Strömungsgeschwindigkeit des Wassers bildete sich ein dünner Farbfaden aus, der sich geradlinig und parallel der Rohrachse zur Mündung hin bewegte. Es lag eine Schichtenströmung vor, bei der kein nennenswerter Impulsaustausch quer zur Hauptströmungsrichtung erfolgte. Eine Erhöhung der Strömungsgeschwindigkeit im Rohr über eine kritische Geschwindigkeit hinaus bewirkte den Umschlag zur turbulenten Strömung, bei der der

Farbfaden starke unregelmäßige, zufallsbedingte Bewegungen quer zur Rohrachse zeigte und schließlich völlig zerflatterte [Gerst91.01].

Gleichzeitig wurde das ursprünglich parabolische Profil der axialen Geschwindigkeit pfpfenförmiger. Dies ist auf die radiale Dispersion der Fluidelemente zurückzuführen, die eine Vergleichmäßigung der Impulsverteilung über den Rohrquerschnitt bewirkt.

Mathematisch betrachtet zeichnet sich die Turbulenz dadurch aus, dass bei einer Strömung an jedem Ort eine transportierte Größe φ (z. B. die Konzentration des Wassers an Farbpigmenten) über den Zeitraum τ_0 einen Mittelwert $\bar{\varphi}$ hat, der von einem zufälligen Schwankungswert $\hat{\varphi}$ überlagert wird, d. h. $\varphi'(t) = \bar{\varphi} + \hat{\varphi}(t)$. Der Erwartungswert $\bar{\varphi}$ ist dabei über die Beziehung

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{\tau_0} \int_{\tau_a}^{\tau_a + \tau_0} \varphi'(t) dt \quad \text{Gleichung 2-4}$$

mit dem Instantanwert $\varphi'(t)$ verknüpft.

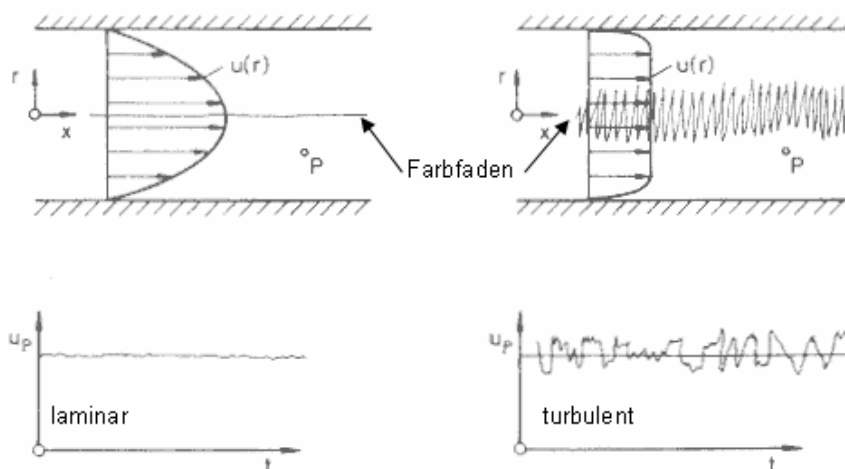


Abbildung 2-4: Laminare (links) und turbulente (rechts) Rohrströmung. Oben: Verteilung der Axialgeschwindigkeit, unten: Zeitlicher Verlauf der Axialgeschwindigkeit am Punkt P, [Gerst91.01]

Ursache für die Turbulenz sind Vorgänge zwischen den einzelnen Scherschichten, bei denen sich Strömungswirbel bilden und ablösen. Sie bewegen sich durch das Strömungsgebiet und zerfallen dabei in kleinere Wirbel. Diese unterliegen ebenfalls einem Zerfallsprozess. Schließlich wird die in den kleinsten Wirbeln enthaltene kinetische Energie vollständig viskos dissipiert und so in innere Energie des Fluids umgesetzt. Die Gesamtheit dieses Prozesses wird als Energie- oder Wirbelkaskade bezeichnet. Der Großteil der kinetischen Turbulenzenergie ist in den niederfrequenten großen Wirbeln enthalten, die am Anfang der Wirbelkaskade stehen. Mit abnehmender Größe der Wirbel nimmt deren Frequenz zu. Die Verteilung der

Turbulenzenergie über den Wellenzahlbereich ist in Abbildung 2-5 schematisch dargestellt.

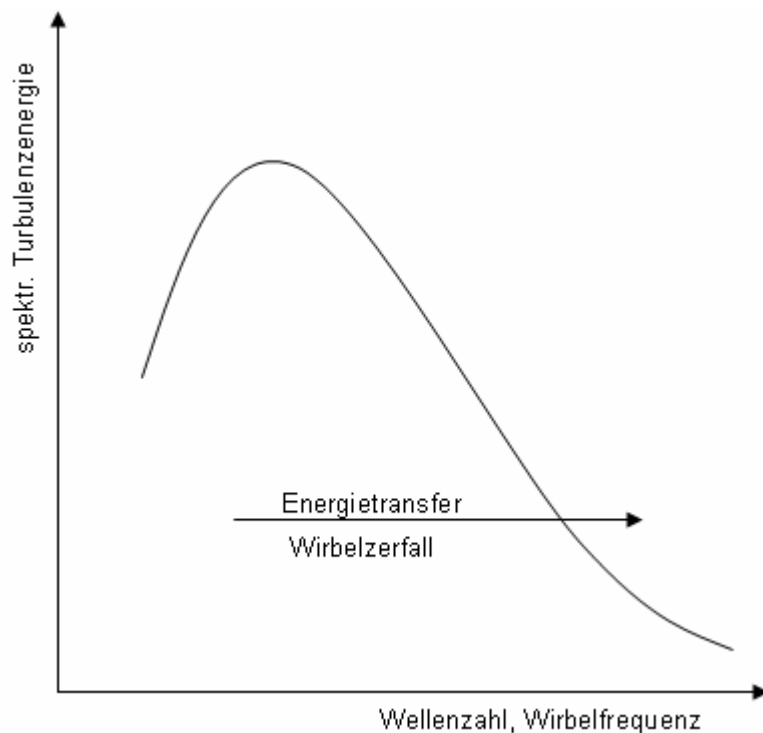


Abbildung 2-5: Energiespektrum der kinetischen Turbulenzenergie

Bei ihrer Bewegung durch das Strömungsgebiet transportieren die Wirbel die Größe φ , wodurch der Betrachter deren geschilderte Fluktuation als Turbulenz wahrnimmt.

Die Abmessungen der großen Wirbel hängen von den Dimensionen des Strömungsraumes ab, die Größe der kleinsten Wirbel lässt sich mit dem Kolmogorov-Längengmaß L_K abschätzen [Görne91.01]:

$$L_K = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{0,25} \quad \text{Gleichung 2-5}$$

mit

- ν : kinematische Viskosität [m^2/s]
- ε : Dissipationsrate [m^2/s^3]

Analog ergibt sich das Kolmogorov-Zeitmaß der kleinen Wirbel zu [Kohne97.01]:

$$\tau_K = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{0,5} \quad \text{Gleichung 2-6}$$

mit

- ν : kinematische Viskosität [m^2/s]
- ε : Dissipationsrate [m^2/s^3]

Die Deutung der Turbulenz als Auftreten von Wirbeln, in denen kinetische (Turbulenz-)Energie gespeichert ist, schafft eine Verknüpfung zu den nachfolgend vorgestellten Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen, in denen die Terme, die die Turbulenz berücksichtigen, ebenfalls als Form kinetischer Energie aufgefasst werden können.

2.2.2 Die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen

In Gleichung 2-1 ist der Einfluss der Turbulenz auf den Transport der skalaren Größe φ nicht explizit berücksichtigt. Zur Erweiterung der Gleichung auf den turbulenten Fall wird die allgemeine Größe φ als zeitlich fluktuierende Größe φ' interpretiert. Diese wird in ihren Erwartungswert $\bar{\varphi}$ und ihren turbulent schwankenden Anteil $\hat{\varphi}$ aufgeteilt:

$$\varphi'(t) = \bar{\varphi} + \hat{\varphi}(t)$$

Gleichung 2-7

Wird diese Beziehung für $\varphi = u_i$ (spezifischer Impuls) in Gleichung 2-1 eingesetzt und diese anschließend Reynolds-gemittelt [Fluen06.01, Görne91.01], so erhält man die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen zur Beschreibung des Impulstransports im turbulenten Fall:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\bar{\rho} \hat{u}_i \hat{u}_j)$$

zeitliche
Änderung

konvektiver
Transport

laminarer
Impulstransport

turbulenter
Impulstransport

Gleichung 2-8

In diesen RANS-Gleichungen (Reynolds-averaged-Navier-Stokes-equations) tritt der neue Term $(-\bar{\rho} \hat{u}_i \hat{u}_j)$ auf. Da er die Dimension einer Spannung hat, kann er als turbulenzbedingte Zusatzspannung verstanden werden und wird daher als Reynolds-Spannung bezeichnet. Der Ausdruck $\hat{u}_i \hat{u}_j$ hat formal die Dimension einer spezifischen Energie ([J/kg]) und kann als die spezifische kinetische Energie interpretiert werden, die in den Geschwindigkeitsfluktuationen enthalten ist. Da praktisch nur die (über einen geeigneten Zeitraum) gemittelten Größen interessieren, vereinfacht man die Schreibweise für die zeitgemittelte Größe ($\bar{\varphi}$) häufig zu φ . Gleichung 2-1 gilt damit gleichermaßen für den turbulenten wie für den laminaren Fall. Bei turbulenter Strömung ist für die Größe Γ_φ der turbulente, bei laminarer Strömung der laminare Austauschkoefizient einzusetzen.

Zur Beschreibung der Reynolds-Spannungen in die Raumrichtungen, d. h. zur Schließung des zu lösenden Gleichungssystems, werden zusätzliche Transportgleichungen benötigt. Diese werden von den nachfolgend beschriebenen Turbulenzmodellen zur Verfügung gestellt.

2.2.3 Einphasen-Turbulenzmodelle

2.2.3.1 Das Reynolds-Stress-Modell

Beim Reynolds-Stress-Modell werden die Transportgleichungen der sechs Geschwindigkeitskorrelationen $\overline{\hat{u}_i \hat{u}_j}$ gelöst. Hierdurch wird die Anisotropie (Richtungsabhängigkeit) der Turbulenz berücksichtigt, so dass sich dieses Modell besonders für Anwendungsfälle hoher Turbulenz-Anisotropie wie stark gekrümmte, drallbehaftete Strömungen und komplexe Geometrien eignet. Es wird auch in Fällen benutzt, in denen eine möglichst genaue Beschreibung von Strömung und Turbulenz gewünscht ist.

Zusätzlich zu den Transportgleichungen für die Reynoldsspannungen muss die Transportgleichung der Dissipationsrate der kinetischen Turbulenzenergie (ε) gelöst werden, so dass zur Beschreibung des turbulenten Impulstransports insgesamt sieben Gleichungen zu lösen sind. Hierdurch entsteht ein erheblicher Rechenaufwand.

Für die Simulation des komplexen Zementherstellungsprozesses mit der starken Kopplung der einzelnen Größen ist dieses Modell daher nur bedingt geeignet, da es den ohnehin hohen Rechenaufwand durch seine sieben zusätzlichen Gleichungen weiter erhöht. Zusätzlich konvergiert das Modell verhältnismäßig schlecht und vergrößert damit die numerischen Schwierigkeiten. Die Strömungsverhältnisse beim Zementherstellungsprozess sind darüber hinaus - abgesehen von den Zyklonen zur Mehlvorwärmung und Strangsträhnendurchmischung - nicht so komplex, dass die Verwendung des RSM-Modells wesentliche Vorteile erwarten ließe. Die exakte Auflösung der Strömungsverhältnisse in den Zyklonen ist jedoch für die CFD-Simulation des Gesamtprozesses nicht erforderlich. Für die Verwendung des RSM-Modells besteht daher bei der CFD-Simulation eines Vorcalcinator keine Notwendigkeit.

2.2.3.2 Das k- ε -Modell

Das k- ε -Modell unterstellt, dass die Turbulenz der Strömung isotrop ist, d. h. die Geschwindigkeitsfluktuationen in alle Raumrichtungen gleich groß sind. Für die Reynolds-Spannungen ergibt sich damit:

$$\overline{\hat{u}_1 \hat{u}_1} = \overline{\hat{u}_2 \hat{u}_2} = \overline{\hat{u}_3 \hat{u}_3} = \overline{\hat{u}_i \hat{u}_i} \quad \text{Gleichung 2-9}$$

Für die (nunmehr richtungsunabhängige) kinetische Turbulenzenergie k der Strömung gilt damit:

$$k = \frac{3}{2} \overline{\hat{u}_i \hat{u}_i} \quad \text{Gleichung 2-10}$$

Anstelle der 6 Transportgleichungen für die Reynolds-Spannungen beim RSM-Modell muss beim k- ε -Modell lediglich die Transportgleichung für die kinetische Turbulenzenergie gelöst werden. Wie beim RSM-Modell ist auch hier zusätzlich die Transportgleichung der Dissipationsrate ε zu lösen. Insgesamt sind daher nur zwei statt der sieben Transportgleichungen beim RSM-Modell zu lösen, wodurch sich eine signifikante Rechenzeiteinsparung ergibt. Ferner konvergiert das k- ε -Modell meist erheblich besser als das RSM-Modell. Es ist daher gut zur Verwendung bei der CFD-

Simulation des Vorcalciniierungsprozesses geeignet. Die Bilanzgleichungen für k und ε lauten:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad \text{Gleichung 2-11}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon u_j) = \quad \text{Gleichung 2-12}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon.$$

mit

ρ :	Fluidichte [kg/m ³]
k :	kinetische Turbulenzenergie [m ² /s ²]
ε :	Dissipationsrate der kinetischen Turbulenzenergie [m ² /s ³]
u_j :	Geschwindigkeit in Richtung j [m/s]
μ :	dynamische Viskosität [kg/(ms)]
μ_t :	turbulente Viskosität [kg/(ms)]
x_j :	Raumrichtung j [m]
$\sigma_k, C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}, C_{3\varepsilon}$:	Modellkonstanten des k - ε -Modells [-]

Hierbei steht G_k für die Turbulenzproduktion durch Gradienten der mittleren Geschwindigkeit und G_b für die Produktion infolge von Auftriebskräften. Der Term Y_m berücksichtigt die bei hohen Machzahlen reduzierte Ausbreitungsrate der Turbulenz. Er kann jedoch bei der Calcinatorsimulation, bei der die Machzahl sehr klein ist, vernachlässigt werden.

$$G_k = -\rho \overline{\hat{u}_i \hat{u}_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad \text{Gleichung 2-13}$$

$$G_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho \text{Pr}_t} \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad \text{Gleichung 2-14}$$

$$Y_m = 2\rho \varepsilon M_t^2 \quad \text{Gleichung 2-15}$$

Hierbei ist Pr_t die Prandtl-Zahl und M_t die Machzahl bei turbulenter Strömung.

2.2.3.3 DNS und LES

Bei der DNS-Simulation (direct numerical simulation) findet keine Modellierung der Reynolds-Spannungen statt. Stattdessen wird die allgemeine Transportgleichung in ihrer nicht Reynolds-gemittelten Form direkt gelöst. Dies erfordert eine Auflösung in der Größenordnung der kleinsten Längen- und Zeitmaßstäbe der Turbulenz. Entsprechend groß ist der hiermit verbundene Rechenaufwand. Die DNS-Simulation ist daher nur für kleine Rechengebiete und einfache Geometrien geeignet. Ihr Vorteil ist,

dass sie auf keinen weiteren Modellannahmen beruht und daher universell gültig ist. Grundlagenuntersuchungen werden häufig mittels DNS-Simulationen durchgeführt.

Bei der Large-Eddy-Simulation (LES) erfolgt eine Filterung der Turbulenzwirbel anhand ihrer Größe. Große Wirbel können kaum allgemeingültig modelliert werden, da sie von der Geometrie und den Randbedingungen des Strömungsgebiets abhängen. Große Wirbel werden daher bei der LES-Simulation mittels DNS-Rechnung direkt aufgelöst. Kleine Wirbel dagegen sind meistens von Geometrie und Randbedingungen weniger abhängig und werden daher bei der LES-Simulation modelliert. Durch die Modellierung der kleinen Wirbel wird der Rechenaufwand gegenüber der DNS-Simulation beträchtlich reduziert.

2.3 Zweiphasen-Modellierung

2.3.1 Euler-Euler- und Euler-Lagrange-Ansatz

Für die mathematische Beschreibung zwei- oder mehrphasiger Strömungen bestehen unterschiedliche Möglichkeiten. Beim Euler-Euler-Ansatz werden beide Phasen in der Euler-Darstellung betrachtet, während beim Euler-Lagrange-Ansatz die diskrete Phase mit dem Lagrange-Modell und die kontinuierliche Phase mit dem Euler-Modell beschrieben wird.

Der Euler-Euler-Ansatz geht davon aus, dass alle Phasen parallel vorliegen und sich gegenseitig durchdringen. Die Transportgleichungen aller Phasen und damit die Phasenwechselwirkungen können daher gleichzeitig gelöst werden [Liebe03.01]. Ein z. Z. noch erheblicher Nachteil ist der Rechenzeitbedarf, der speziell bei polydispersen Partikeln rapide ansteigt, da für jede Partikelgrößenklasse mehrere Transportgleichungen gelöst werden müssen. Jede zusätzlich betrachtete Partikeleigenschaft (z. B. Ausbrand- oder Pyrolysegrad eines Kohlepartikels, Calcinierungsgrad oder wirksame Oberfläche eines Kalkmehlpartikels) verlangt die Lösung einer weiteren Transportgleichung. Die Formulierung dieser Transportgleichungen ist besonders dann problematisch, wenn wie bei den genannten Beispielen die betrachtete Partikeleigenschaft von der Partikelvorgeschichte abhängig ist. Speziell bei komplexen Vorgängen wie chemischen Reaktionen bereitet die Kopplung der Phasen zusätzliche mathematische Schwierigkeiten.

Beim Euler-Lagrange-Ansatz bestehen diese Erschwernisse nicht. Die Bahn einzelner Partikel wird hier mittels der Lagrange-Beschreibung über die gesamte Partikel-Lebensdauer kontinuierlich verfolgt, wobei die Partikeleigenschaften ohne explizite Modellierung ihres Transports mitgeführt werden. Die disperse Phase kann daher fast beliebig genau aufgelöst werden. Gleichzeitig ist der Rechenaufwand für die disperse Phase relativ gering. Im Rahmen dieser Arbeit wurde daher ein Euler-Lagrange-Ansatz verwendet, wobei die Kopplung zwischen den Phasen über das Particle-Source-In-Cell-Verfahren (PSIC) [Crowe77.01] realisiert wurde.

Bei diesem gekoppelten Euler-Lagrange-Verfahren erfolgt zuerst eine iterative Berechnung der reinen Gasphase unter Vernachlässigung des Partikeleinflusses. Nach Erhalt einer hinreichend konvergenten Lösung für die Gasphase erfolgt die Partikelbahnberechnung des Lagrange-Moduls nach Gleichung 2-3. Gleichzeitig werden die Rückwirkungen des Partikels (Impuls-, Stoff- oder Energieübertragung vom Partikel auf die Gasphase) erfasst. Diese werden für jede Zelle über alle Partikel, die diese Zelle durchlaufen, summiert. Nach Berechnung aller Partikelbahnen

ist damit der vollständige Einfluss der Partikel auf jede einzelne Zelle bekannt. Die erhaltenen Summen werden als zusätzliche Quellterme S_{ϕ_i} der jeweiligen Zelle in die entsprechende Transportgleichung der Gasphase (Gleichung 2-1) einbilanziert. Wegen dieser neuen, aktualisierten Quellterme für die Gasphase ist anschließend eine Neuberechnung des Gasphasenfeldes erforderlich. Sobald die Lösung der Gasphase wieder konvergent ist, erfolgt eine erneute Partikelbahn-Berechnung mit erneuter Aktualisierung der Quellterme. Dieser sequentielle Prozess aus iterativer Lösung der Gasphasengleichungen und anschließender Berechnung der Partikelbahnen und der Partikelrückwirkungen (= Quellterme für die Gasphase) wird wiederholt, bis eine konvergente Gesamtlösung für beide Phasen erreicht ist (Abbildung 2-6).

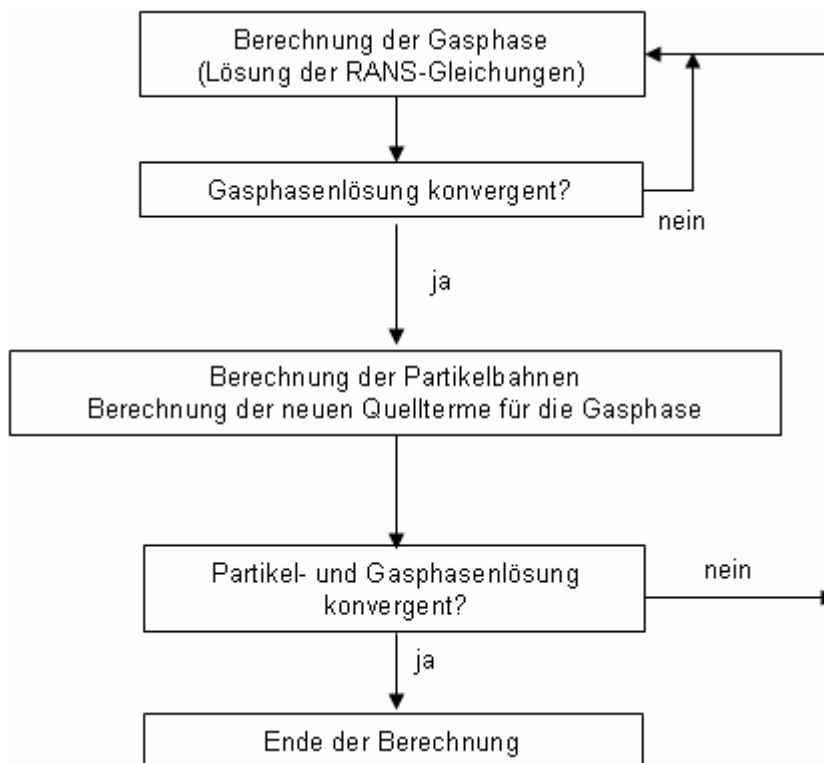


Abbildung 2-6: Berechnungsschema für den gekoppelten Euler-Lagrange-Ansatz

2.3.2 Lagrange-Betrachtung bei turbulenten Zweiphasen-Strömungen

Das im vorherigen Abschnitt vorgestellte gekoppelte Euler-Lagrange-Verfahren wird analog auch für turbulente Strömungen angewendet. Für die Impulsbilanz eines Partikels gilt grundsätzlich auch bei turbulenten Strömungen der bei konstanter Partikelmasse zu Gleichung 2-3 äquivalente Ausdruck

$$\frac{d}{dt}v_j = \frac{F_d}{m_p} + \frac{g_j(\rho_p - \rho_f)}{\rho_p} + \frac{F_j}{m_p} \quad \text{Gleichung 2-16}$$

mit

- v_j : Partikelgeschwindigkeit in Richtung j [m/s]
- u_j : Fluidgeschwindigkeit in Richtung j [m/s]
- F_d : Schleppkraft [N]
- m_p : Partikelmasse [kg]
- g_j : Erdbeschleunigung in Richtung j [m/s²]
- ρ_p : Partikeldichte [kg/m³]
- ρ_f : Fluiddichte [kg/m³]

Der erste Term berücksichtigt dabei die Schlepp- und Widerstandskräfte, der zweite den Auftrieb und der dritte eventuelle Zusatzkräfte wie z. B. Magnetkräfte.

Der für die Schleppkraft F_d üblicherweise verwendete Ansatz lautet:

$$F_d = \frac{18\eta}{\rho_p d_p^2} (u_j - v_j) m_p \quad \text{Gleichung 2-17}$$

mit

- η : dynamische Viskosität [kg/(m s)]
- ρ_p : Partikeldichte [kg/m³]
- d_p : Partikeldurchmesser [m]
- v_j : Partikelgeschwindigkeit in Richtung j [m/s]
- u_j : Fluidgeschwindigkeit in Richtung j [m/s]
- m_p : Partikelmasse [kg]

Für die Berechnung des Schleppkraft-Koeffizienten C_D existieren unterschiedliche Ansätze [Fluen06.01].

Auch bei stationären turbulenten Strömungen verfolgt ein Partikel, das wiederholt von der gleichen Stelle aus das Strömungsgebiet durchläuft, jedes Mal leicht unterschiedliche Bahnen. Dies ist auf die Turbulenz in der Gasphase zurückzuführen, die das Partikel beeinflusst. Für ein Partikel in der Lagrange-Beschreibung besteht das

Strömungsgebiet aus einer ununterbrochenen Aneinanderreihung einzelner Gasphasenwirbel, die das Partikel auf seiner Bahn durchquert. Daher ist für die Gasgeschwindigkeit u_j in Gleichung 2-16 die jeweilige instantane Gasphasengeschwindigkeit $u'_j(t)$ einzusetzen, die die turbulenzbedingten Fluktuationen berücksichtigt:

$$u'_j(t) = \bar{u}_j + \hat{u}_j(t) \quad \text{Gleichung 2-18}$$

Die Lösung der Reynolds-gemittelten-Navier-Stokes-Gleichungen (Gleichung 2-8) liefert jedoch nur die zeitgemittelte Gasphasengeschwindigkeit \bar{u}_j . Die Fluktuationsgröße $\hat{u}_j(t)$ muss daher modelliert werden.

Beim Discrete Random-Walk-Modell (DRW) [Fluen06.01] werden die Fluktuationsgrößen mittels der Reynolds-Spannungen modelliert. Es wird angenommen, dass die Fluktuationen $\hat{u}_j(t)$ Gauß-verteilt sind. Damit ergibt sich

$$\hat{u}_j(t) = \zeta \sqrt{\overline{\hat{u}_j^2}}, \quad \text{Gleichung 2-19}$$

mit

ζ : normalverteilte Zufallszahl aus [0;1] [-]

$\overline{\hat{u}_j^2}$: zeitgemittelte Fluktuation in Raumrichtung j [m/s]

Beim RSM-Modell sind die Fluktuationen in alle Raumrichtungen bekannt, da hier die Reynolds-Spannungen $\overline{\hat{u}_j^2}$ direkt berechnet werden. Beim k- ϵ -Modell, das Turbulenzisotropie unterstellt, vereinfacht sich der Zusammenhang, da die Fluktuationen in alle Raumrichtungen gleich groß sind. Aus Gleichung 2-9 und Gleichung 2-10 folgt:

$$\sqrt{\overline{\hat{u}_1^2}} = \sqrt{\overline{\hat{u}_2^2}} = \sqrt{\overline{\hat{u}_3^2}} = \sqrt{\frac{2}{3}k}, \quad \text{Gleichung 2-20}$$

da sich die kinetische Turbulenzenergie k in alle Raumrichtungen gleichmäßig verteilt. Der fluktuierende Geschwindigkeitsanteil ist damit berechenbar:

$$\hat{u}_j(t) = \zeta \sqrt{\frac{2}{3}k}. \quad \text{Gleichung 2-21}$$

Durch die Modellierung der Fluktuationen in die einzelnen Raumrichtungen mit voneinander unabhängigen Zufallszahlen wird unterstellt, dass die Fluktuationen untereinander nicht korreliert sind, was jedoch nicht zutreffend ist.

Zur Bestimmung der Geschwindigkeits-Zeit-Funktion des Partikels muss Gleichung 2-16 über die Zeit integriert werden:

$$v_j(t) = \int_{\tau_\alpha}^{\tau_\omega} \frac{d}{dt} v_j(t) dt .$$

Gleichung 2-22

Die Integration der Geschwindigkeits-Zeit-Funktion ergibt die gesuchte Ort-Zeit-Funktion des Partikels in der Lagrange-Betrachtung:

$$s_j(t) = \int_{\tau_\alpha}^{\tau_\omega} v_j(t) dt .$$

Gleichung 2-23

Bei der Wahl des Zeitschritts der Integration $\tau = \tau_\omega - \tau_\alpha$ ist zu beachten, dass die Geschwindigkeit des Fluids, das das Partikel umgibt, die instantane Fluidgeschwindigkeit im Wirbel nach Gleichung 2-18 ist. Diese Geschwindigkeit liegt jedoch nur so lange vor, wie

- der Wirbel existiert, d. h. die Wirbellebensdauer τ_e noch nicht überschritten wurde

und

- das Partikel sich noch im betrachteten Wirbel befindet, d. h. diesen noch nicht vollständig durchquert hat.

Bezeichnet man mit τ_c die Zeit, die das Partikel benötigt, um den Gasphasenwirbel zu durchqueren, so gilt für den größten zulässigen Zeitschritt τ_{\max} , über den in Gleichung 2-22 und Gleichung 2-23 integriert werden darf:

$$\tau_{\max} = \min(\tau_e, \tau_c) .$$

Gleichung 2-24

mit

τ_e : Wirbellebensdauer [s]

τ_c : Zeitraum, den das Partikel zum Durchqueren des Wirbels benötigt [s]

Nach der Integration über den Zeitschritt $\tau = \tau_{\max}$ muss daher eine neue instantane Gaswirbelgeschwindigkeit nach Gleichung 2-18 berechnet werden, worauf der gesamte Integrationsvorgang der Partikel-Bewegungsgleichung zu wiederholen ist.

Für die Zeit τ_c , die das Partikel zum Durchqueren des Wirbels benötigt, gilt dabei die Beziehung

$$t_c = \tau_P \ln \left[1 - \left(\frac{L_e}{\tau_P |u - v|} \right) \right] \quad \text{Gleichung 2-25}$$

mit

- τ_P : Partikelrelaxationszeit [s]
- L_e : Wirbellängen-Maßstab [m]
- u : Fluidgeschwindigkeit [m/s]
- v : Partikelgeschwindigkeit [m/s]

Die Berechnung der Wirbellebensdauer t_e erfolgt dabei nach der Beziehung

$$t_e = -\tau_L \log(r) \quad \text{Gleichung 2-26}$$

mit

- τ_L : Lagrange-Zeitmaßstab des Fluids [s]
- r : gleichverteilte Zufallszahl aus [0;1] [-]

Für den Lagrange-Maßstab wird i. A. ein halbempirischer Ansatz der Form:

$$\tau_L = C_L \frac{k}{\varepsilon} \quad \text{Gleichung 2-27}$$

mit

- k : kinetische Turbulenzenergie [m^2/s^2]
- ε : Dissipationsrate von k [m^2/s^3]
- C_L : empirische Konstante [-]

gewählt. Für die Konstante C_L werden in der Literatur unterschiedliche Werte angegeben. Eine Übersicht gibt Tabelle 2-2.

Vorgeschlagener Wert für c_L	Anwendungsbereich/Gültigkeit	Quelle
0,350	k. A.	[Mosta88.01]
$5/12 = 0,417$	k. A.	Calabrese und Middleman (1979), aus [Mosta85.01]
0,165	k. A.	[Chen85.01]
0,300	RSM-Modell	[Fluen06.01]
0,150	k- ε -Modell	[Fluen06.01]

Tabelle 2-2: Konstanten für die Ermittlung des Lagrange-Zeitmaßes

2.4 Strahlungsmodellierung

2.4.1 Strahlungsmodelle

Elektromagnetische Wellen bewirken einen Austausch durch Strahlung. Zwischen zwei oder mehreren Körpern kann aufgrund ihrer Temperatur sowie ihres Emissions-, Streuungs- und Absorptionsvermögens ein Energietransport erfolgen. Dieser Mechanismus wird vor allem bei höheren Temperaturen bedeutsam.

Wird in der Transportgleichung für die allgemeine Größe ϕ die Gesamtenthalpie h_G eingeführt, so ergibt sich die energetische Bilanzierung für ein Gemisch aus i Komponenten wie folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_j}(u_j(\rho e + p)) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[k_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_i h_i J_i + \tau u_j \right] + S_h \quad \text{Gleichung 2-28}$$

zeitliche Änderung	konvektiver Transport	Leitung	diffusiver Transport	viskose Dissipation	Quellen + Senken
-----------------------	--------------------------	---------	-------------------------	------------------------	---------------------

mit

ρ :	Fluiddichte [kg/m ³]
e :	spezifische Energie des Gemischs [J/kg]
p :	Druck [Pa]
k_{eff} :	effektive Wärmeleitfähigkeit [W/(m K)]
h_i :	spez. Enthalpie der Komponente i [J/kg]
J_i :	Diffusionsstrom der Komponente i [kg/m ² s]
τ :	turbulente Schubspannung [N/m ²]
u_j :	Strömungsgeschwindigkeit in Richtung j [m/s]

Hierbei ist die spezifische Energie des Gemischs definiert als

$$e = h - \frac{p}{\rho} + \frac{u^2}{2} \quad \text{Gleichung 2-29}$$

mit

h :	spezifische Enthalpie des Gemischs [J/kg]
p :	Druck [Pa]
ρ :	Dichte des Gemischs [kg/m ³]
u :	Strömungsgeschwindigkeit des Gemischs [m/s]

Die Enthalpie des Gemischs ist dabei definiert als

$$h = \sum_i y_i h_i .$$

Gleichung 2-30

mit

- y_i : Molenbruch der Spezies i [-]
 h_i : spez. Enthalpie der Spezies i [J/kg]

Die Speziesenthalpie h_i ist definiert als:

$$h_i(T) = \int_{T_{ref}}^T c_{p,i}(t) dt .$$

Gleichung 2-31

mit

- T : Temperatur [K]
 $c_{p,i}(t)$: spez. Wärmekapazität der Spezies i bei der Temperatur t [J/kg]
 T_{ref} : Bezugstemperatur [K]

Der Quellterm S_h in Gleichung 2-28 enthält dabei u. a. die aus dem Strahlungswärmeaustausch resultierenden Terme.

Der Strahlungswärmeaustausch wird durch die Bilanzgleichung der Gesamtstrahlungsintensität I beschrieben, die für ein absorbierendes, emittierendes und streuendes Medium lautet:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} \underset{\text{Absorption}}{(a + \sigma_s) I(\vec{r}, \vec{s})} = \underset{\text{Emission}}{an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi}} + \underset{\text{Streuung}}{\frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Theta(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega}$$

Gleichung 2-32

mit

- I : Strahlungsintensität [W/m²]
 \vec{r} : Ortsvektor
 \vec{s} : Richtungsvektor der Strahlung
 \vec{s}' : Richtungsvektor der Streuung
 a : Absorptionskoeffizient [1/m]
 σ_s : Streukoeffizient [1/m]
 σ : Stefan-Boltzmann-Konstante; $5,627 \cdot 10^{-8}$ [W/m²K⁴]
 n : Brechungsindex [-]
 T : Temperatur [K]
 $\Theta(\vec{s} \cdot \vec{s}')$: Phasenfunktion [rad]
 Ω : Winkel, über den der Körper streut [rad]

Eine Schwierigkeit hierbei ist, dass die optischen Eigenschaften des Mediums vielfach von der Wellenlänge der Strahlung abhängig sind. Gleichung 2-32 muss daher streng betrachtet in nach der Wellenlänge differenzierter Form aufgestellt und anschließend über das betrachtete Wellenlängenspektrum integriert werden, wobei die Wellenlängenabhängigkeit der Strahlungswerte zu berücksichtigen ist. Zur Vereinfachung verwendet man daher vielfach - wie in Gleichung 2-32 - über das gesamte Wellenlängenspektrum gemittelte Stoffwerte. Ein Strahler, dessen optische Eigenschaften unabhängig von der Wellenlänge sind, wird als grauer Strahler bezeichnet.

Gleichung 2-32 ist allerdings auch mit Hilfe von numerischen Methoden nur sehr schwer zu lösen. Der Strahlungsaustausch wird deshalb mit Modellen beschrieben, die in drei Hauptgruppen zusammengefasst werden können.

Beim Zonenmodell wird der zu simulierende Bereich in verschiedene Volumina und Flächen unterteilt. Der Strahlungsaustausch kann hierbei mit Hilfe von Sichtfaktoren, die eine Relation zwischen den Strahlungspartnern herstellen, über ein lineares Gleichungssystem berechnet werden. Die Berechnung der Sichtfaktoren ist jedoch numerisch sehr aufwändig.

Beim Strahlverfolgungsmodell werden einzelne Strahlen durch das Berechnungsgebiet verfolgt und so lange bilanziert, bis deren Energie in Folge der Absorption einen Grenzwert unterschreitet. Hier lässt sich zwischen stochastischen Methoden (z. B. der Monte-Carlo-Methode) und deterministischen Methoden (z. B. discrete transfer method) unterscheiden.

Bei der Fluss-Methode wird die Anzahl der Raumrichtungen auf 6 (3D) bzw. 4 (2D) diskrete Raumrichtungen reduziert. Diese Vereinfachung erlaubt es, die Strahlungsgleichung analog zur allgemeinen Transportgleichung (Gleichung 2-2) zu modellieren.

Beim einfachsten Fluss-Modell, dem P-1-Modell, ergibt sich für den Strahlungsfluss q_r im grauen Gas [Fluent06.01]:

$$q_r = -\frac{1}{3(a + \sigma_s) - C\sigma_s} \nabla G. \quad \text{Gleichung 2-33}$$

mit

- q_r : Strahlungswärmefluss [W/m²]
- a : Absorptionskoeffizient [1/m]
- σ_s : Streukoeffizient [1/m]
- C : Phasenfunktions-Koeffizient [-]
- G : einfallende Strahlung [W/m²]

Hieraus ergibt sich:

$$-\nabla q_r = aG - 4a\sigma T^4 \quad \text{Gleichung 2-34}$$

Dieser Ausdruck kann direkt als Quellterm S_h in Gleichung 2-28 eingesetzt werden.

Das Rosseland-Modell ergibt sich aus dem P-1-Modell mit einigen Vereinfachungen, die für optisch dichte Medien zulässig sind:

$$q_r = -16\sigma\Gamma n^2 T^3 \nabla T \quad . \quad \text{Gleichung 2-35}$$

mit

$$\Gamma = \frac{1}{3(a + \sigma_s) - C\sigma_s} \quad \text{Gleichung 2-36}$$

- q_r : Strahlungswärmefluss [W/m²]
- σ : Stefan-Boltzmann-Konstante; $5,627 \cdot 10^{-8}$ [W/m²K⁴]
- n : Brechungsindex [-]
- T : Temperatur [K]
- a : Absorptionskoeffizient [1/m]
- σ_s : Streukoeffizient [1/m]
- C : Phasenfunktions-Koeffizient [-]
- G : einfallende Strahlung [W/m²]

Sowohl das P-1- als auch das Rosseland-Modell sind besonders zur Strahlungsmodellierung in optisch dichten Medien geeignet [Fluen06.01]. Die optische Dichte ist dabei das Produkt

$$aL \quad \text{Gleichung 2-37}$$

mit

- a : Absorptionskoeffizient [1/m]
- L : charakteristische Apparateabmessung [m]

Als optisch dicht gilt ein Medium, wenn seine optische Dichte größer eins ist. Bei einer optischen Dichte größer drei, wie sie im Calcinator vorliegt, wird das Rosseland-Modell im Allgemeinen als dem P-1-Modell überlegen angesehen [Fluen06.01].

2.4.2 Bestimmung der Strahlungsstoffwerte

Die Strahlungsmodelle erfordern jedoch die Kenntnis der Strahlungsstoffwerte Absorptions- und Streukoeffizient. In der klassischen Verbrennungstechnik, in der relativ wenige oder überhaupt keine Partikel in der Strömung vorliegen, kann die Streuung meistens vernachlässigt werden ($\sigma_s = 0$). Die Bestimmung des Absorptionskoeffizienten erfolgt dann sehr oft mit dem halbempirischen wsgg-Modell (weighted sum of gray gases) [Coppa83.01, Smith82.01]. Dieses Modell stellt einen guten Kompromiss zwischen der zu ungenauen Modellierung der Gasphase als "graues" Gas und der zu aufwändigen Modellierung einzelner Bänder dar.

Das Modell unterstellt, dass das Gesamtemissionsverhältnis ε des Gasgemischs über die Strahlungsweglänge s sich wie folgt darstellen lässt:

$$\varepsilon = \sum a_{\varepsilon,i}(T)(1 - e^{-a_i p s})$$

Gleichung 2-38

mit

$a_{\varepsilon,i}(T)$: Wichtungsfaktor für das Emissionsverhältnis der i -ten Komponenten im Gemisch bei der Temperatur T [-]

T : Temperatur [K]

a_i : Absorptionskoeffizient der i -ten Komponente [1/m]

p : Summe der Partialdrücke aller Gasspezies, die am Strahlungsaustausch teilnehmen [Pa]

s : Strahlungsweglänge [m]

Der Wichtungsfaktor $a_{\varepsilon,i}$ wird mittels empirischer Polynome [Coppa83.01, Smith82.01] berechnet, die dessen Temperaturabhängigkeit berücksichtigen. Aus dem Emissionsverhältnis kann anschließend über das Lambert'sche Gesetz der Absorptionskoeffizient berechnet werden.

2.5 Beschreibung chemischer Reaktionen

2.5.1 Beschreibung der Reaktionsstöchiometrie und der Reaktionsabläufe

In technischen Verbrennungssystemen werden Brennstoffe eingesetzt, deren chemisch gebundene Energie durch Verbrennung in thermische Energie umgesetzt wird. Der Hauptteil des Energieumsatzes erfolgt dabei auch bei flüssigen und den meisten festen Brennstoffen in einer homogenen Gasphasenreaktion mit (Luft-)Sauerstoff. Bei flüssigen Brennstoffen gehen dieser Verbrennung die Zerstäubung und Verdampfung des Brennstoffs voraus, bei festen Brennstoffen die Pyrolyse, bei der die flüchtigen Komponenten des Brennstoffs freigesetzt werden. Speziell bei festen Brennstoffen ist dabei die Zusammensetzung der gebildeten Gasphasen-Spezies stark vom zeitlichen Verlauf der Verflüchtigung abhängig. Neben der Pyrolyse erfolgt bei festen Brennstoffen der Abbrand des Koks, der neben den inerten zu den nicht-flüchtigen Bestandteilen des Brennstoffs gehört.

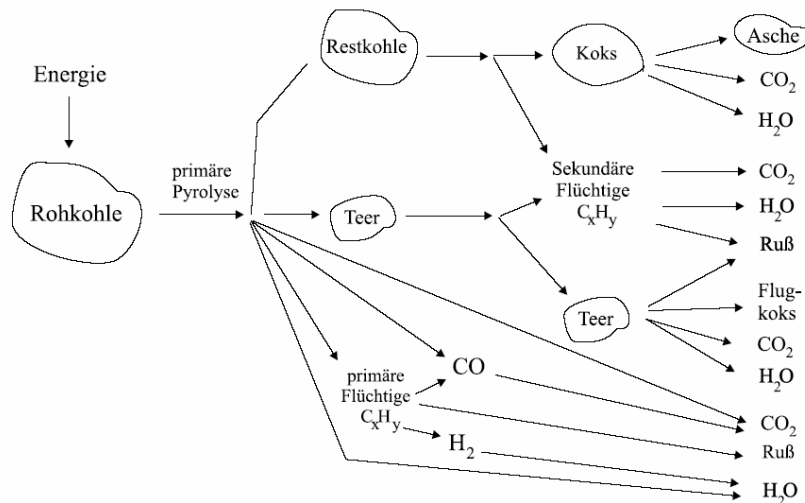


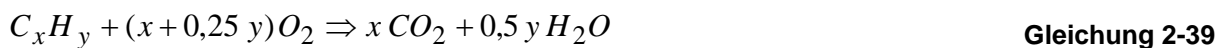
Abbildung 2-7: Schematisches Modell der Verbrennung von Kohle [Görne91.01]

2.5.1.1 Beschreibung des Flüchtigenabbrands

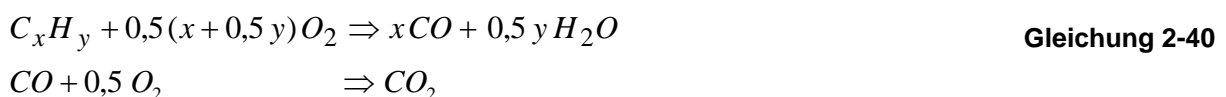
Der Abbrand der Flüchtigen folgt einer Vielzahl z. T. sehr komplexer Reaktionsmechanismen [Cheva93.01]. Ein Großteil der Reaktionspfade führt jedoch mit sehr schnellen Kinetiken zu einer Bildung kleinkettiger Radikale wie CH_3 oder C_2H_5 , so dass diese Reaktionen nicht geschwindigkeitsbestimmend sind. Daher genügt es bei der CFD-Simulation von Verbrennungsprozessen häufig, den Flüchtigenabbrand mit vereinfachenden Globalschemen zu beschreiben.

Dabei werden die Brennstoffflüchtigen meist als generisches Molekül der Form $\text{C}_x\text{H}_y\text{O}_u\text{N}_w\text{S}_v$ betrachtet. Die Bildungsenthalpie und die Atomanzahlen x , y , u , v , w des Moleküls ergeben sich aus der energetischen und stofflichen Analyse des Brennstoffs. Der Schwefel- und Stickstoffgehalt ist hauptsächlich für die Beschreibung der Bildung von Schwefel- und Stickoxiden relevant, hat jedoch keine größere unmittelbare energetische Bedeutung. Zur Beschreibung des Energieumsatzes bei der Verbrennung genügt es, die Brennstoffflüchtigen als generisches Molekül der Form C_xH_y zu betrachten.

Die einfachste Beschreibung des Flüchtigenabbrands ist das Schema für die vollständige Verbrennung eines Kohlenwasserstoffs zu CO_2 und H_2O :



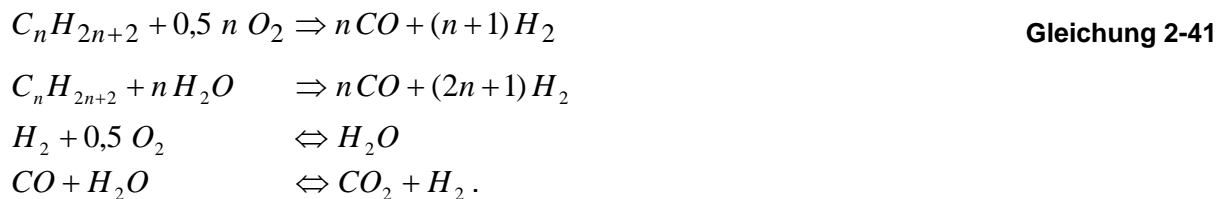
Dabei ist jedoch nicht berücksichtigt, dass der Kohlenstoffwasserstoff über das Zwischenprodukt CO zu CO_2 verbrennt. Die Oxidation des CO zu CO_2 verläuft sehr viel langsamer als der Abbrand des Kohlenwasserstoffs zu CO [Muell98.01]. Bessere und für viele Anwendungen ausreichend genaue Ergebnisse liefert daher die Zugrundelegung eines Zwei-Schritt-Schemas:



Mit diesem Ansatz können die stark unterschiedlichen Reaktionsgeschwindigkeiten der beiden Reaktionen berücksichtigt werden. Ein kinetischer Ansatz für den CO-Ausbrand wird z. B. in [Bock85.01, Görne91.01] angegeben.

Noch detailliertere Ansätze berücksichtigen weitere Zwischenprodukte und lösen einzelne Schritte der Verbrennung feiner auf. Der erste Reaktionsschritt ist hierbei der Zerfall der hochmolekularen Flüchtigen in niedrigere Alkane und Alkene. Für den weiteren Umsatz dieser Zwischenprodukte zu den Endprodukten CO₂, H₂O und (bei O₂-Mangel oder zu kurzer Ausbrandzeit) CO werden in der Literatur unterschiedliche Modelle vorgestellt.

Von Jones und Lindstedt [Jones88.01] stammt das Vier-Schritt-Schema

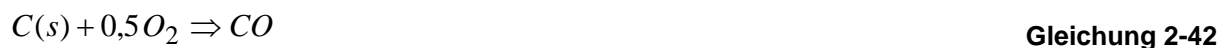


Die ersten beiden Reaktionsschritte beschreiben den Umsatz des Alkans zu den Zwischenprodukten CO und H₂, wobei die erste Reaktion im sauerstoffreichen, die zweite im brennstoffreichen Milieu dominiert. Die dritte Reaktion beschreibt die Oxidation des Zwischenprodukts H₂ zu Wasser und berücksichtigt die bei Temperaturen über 1500 K relevante Rückreaktion von Wasser zu Sauerstoff und Wasserstoff. Die letzte Gleichung beschreibt die Wassergasreaktion, die Rückreaktion ist bereits bei Temperaturen über 600 K relevant.

Das Schema basiert auf der Auswertung von Experimenten mit Vormisch- und Diffusionsflammen, bei denen die Kinetik der Speziesbildung vermessen wurde. Die Arrhenius-Parameter dieser Reaktionen können der Literatur ([Jones88.01, Muell98.01]) entnommen werden.

2.5.1.2 Beschreibung des Koksabbrands und der Pyrolyse

Der Abbrand des Koks ist eine heterogene Reaktion, bei der das Edukt Kohlenstoff in fester, der Luftsauerstoff und das Produkt (CO bzw. CO₂) in gasförmiger Form vorliegen. Der Sauerstoff diffundiert durch die Koksporen zur Reaktionszone und reagiert dort heterogen nach



bzw. (je nach Modellannahme)



Das Produkt diffundiert anschließend durch die Partikelporen in die freie Gasphase. Die Geschwindigkeit des Abbrands kann von der Kinetik der Reaktion und/oder den Stofftransportprozessen bestimmt sein. Entsprechende Modelle werden u. a. in [Görne91.01, Fluen06.01] diskutiert.

Ähnliches gilt für die Pyrolyse. Auch dabei entstehen gasförmige Produkte, deren Bildungsgeschwindigkeit von der Kinetik der Bildungsmechanismen oder der Geschwindigkeit von Energie- oder Stofftransportprozessen bestimmt sein kann. Für entsprechende Modelle wird auf [Görne91.01, Fluen06.01] verwiesen.

2.5.2 Beschreibung der Umsatzgeschwindigkeit in der Gasphase

Die Bildungsrate der Spezies i in einem System aus N_R Reaktionen lässt sich darstellen als

$$\dot{R}_i = \sum_{r=1}^{N_R} \dot{R}_{i,r} \quad \text{Gleichung 2-44}$$

mit

\dot{R}_i : Bildungsrate der Spezies i [kg/s]

$\dot{R}_{i,r}$: Bildungsrate der Spezies i in der r -ten Reaktion [mol/s]

Eine chemische Reaktion lässt sich beschreiben durch



mit

N_S : Anzahl der Spezies

$\nu'_{i,r}$: stöchiometrischer Koeffizient des Edukts i in der r -ten Reaktion [-]

$\nu''_{i,r}$: stöchiometrischer Koeffizient des Produkts i in der r -ten Reaktion [-]

i : Spezies

$k_{f,r}$: Geschwindigkeitskonstante der Reaktion r ; Einheit abhängig von der Reaktionsordnung

$k_{b,r}$: Geschwindigkeitskonstante der Rückreaktion r ; Einheit abhängig von der Reaktionsordnung

Die Beschreibung der Bildungsgeschwindigkeit der Spezies lässt sich damit zurückführen auf die Vorwärts- und Rückwärtsreaktionen der N_S beteiligten Reaktionen.

Voraussetzung für den Ablauf der Gasphasenreaktionen ist zum einen eine ausreichende Durchmischung der Reaktanden, zum anderen eine hinreichend schnelle Reaktionskinetik. Die Reaktionsgeschwindigkeit kann daher sowohl von der Durchmischung der Reaktanden auf molekularer Ebene als auch von der Reaktionskinetik begrenzt werden. Auf diese Aspekte wird in den nachfolgenden Abschnitten eingegangen.

2.5.2.1 Kinetisch kontrollierte Reaktionen

Diese werden meist mit Arrhenius-Ansätzen beschrieben und haben die Form

$$\dot{R}_{i,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_{A,r}/RT} \prod_i c_i^{\eta_{i,r}} . \quad \text{Gleichung 2-46}$$

mit

$\dot{R}_{i,r}$:	Bildungsrate der Komponente i in der r-ten Reaktion [mol/m ³ s]
A_r :	Präexponentieller Faktor der Reaktion r [Einheit variabel]
β_r :	Temperatur-Exponent der Reaktion r [-]
$E_{A,r}$:	Aktivierungsenergie [J/mol]
T :	Temperatur [K]
R :	universelle Gaskonstante
c_i :	Konzentration der i-ten Gasphasenkomponente [mol/m ³]
$\eta_{i,r}$:	Reaktionsordnung der Reaktion r in Bezug auf die Spezies i [-]

Für die Geschwindigkeitskonstante $k_{f,r}$ (Gleichung 2-45) gilt dabei:

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_{A,r}/RT} . \quad \text{Gleichung 2-47}$$

Andere Geschwindigkeitsansätze werden in der Literatur (z. B. Görne91.01]) ausgiebig diskutiert.

2.5.2.2 Mischungskontrollierte Reaktionen

Voraussetzung für den Ablauf einer chemischen Reaktion ist neben der Anwesenheit und hinreichenden Durchmischung der Reaktanden die Verfügbarkeit der erforderlichen Aktivierungsenergie, die meist durch Vermischung der heißen Verbrennungsprodukte mit den kalten Edukten des Verbrennungsvorgangs bereit gestellt wird. Lokale Mischungsvorgänge bis hinunter zur Molekülebene müssen daher bei der Beschreibung chemischer Reaktionen berücksichtigt und beschrieben werden. Der maßgebliche Mechanismus ist hier die Turbulenz. Bei vielen Verbrennungsvorgängen ist die Reaktionskinetik der ablaufenden Reaktionen so schnell, dass der Eduktumsatz nicht von der Kinetik, sondern von der Durchmischung der Reaktionspartner abhängt. Diese wird damit zum geschwindigkeitsbestimmenden Teilschritt der Verbrennung ("mixed = burnt"-Annahme).

Zur Beschreibung solcher Mischungskontrollierten Reaktionen existieren Modelle, die die Eduktvermischung beschreiben und die chemische Kinetik als unendlich schnell ansehen.

Die Wirbelzerfallsmodelle basieren auf der Vorstellung der Wirbelkaskade der Turbulenz (Kapitel 2.2.1). Die Umsatzrate der chemischen Reaktion wird an die Wirbeldissipationsrate gekoppelt, die dem Kehrwert der Wirbellebensdauer nach Gleichung 2-27 proportional ist [Liebe03.01].

Beim Eddy-Break-Up-Modell [Spald77.01] werden zwei Bildungsrate berechnet, zum einen die reaktionskinetisch kontrollierte, zum anderen die Mischungskontrollierte:

$$\dot{R}_{i,kin} = \dot{R}_i \quad \text{(chemisch kontrolliert nach Gleichung 2-44 und Gleichung 2-46)} \quad \text{Gleichung 2-48}$$

$$\dot{R}_{i,mix} = A \rho \sum c_i \frac{\varepsilon}{k} \quad \text{(mischungskontrolliert)}$$

mit

A : Empirische Mischungskonstante; Wert 2

c_i : Konzentration der Spezies i [mol/m³]

ε : Dissipationsrate von k [m²/s³]

k : kinetische Turbulenzenergie [J/kg]

Die effektive Reaktionsrate ergibt sich aus dem Minimum beider Größen:

$$\dot{R}_i = \min(\dot{R}_{i,kin}, \dot{R}_{i,mix}) \quad \text{Gleichung 2-49}$$

Prinzipieller Nachteil dieses Ansatzes ist, dass die kinetische Reaktionsrate \dot{r}_{kin} bekannt sein muss.

Eine Weiterentwicklung des Eddy-Break-Up-Modells ist das Eddy-Dissipation-Modell [Fluen06.01, Magnu76.01]. Dieses definiert ebenfalls zwei Reaktionsraten, von denen die kleinere maßgeblich ist. Dabei wird unterstellt, dass vermischte Edukte sofort verbrennen ("mixed = burnt"):

$$\dot{R}_{1,i,r} = v'_{i,r} \hat{M}_i A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_{NE}}{v'_{NE,r} \hat{M}_{NE}} \right)$$

$$\dot{R}_{2,i,r} = v'_{i,r} \hat{M}_i AB \rho \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{\sum_{NP} Y_{NP}}{\sum_{NP} v''_{NP,r} \hat{M}_i} \right)$$

mit

- $\dot{R}_{1,i,r}$ 1. Bildungsrate der Spezies i in der Reaktion r
- $\dot{R}_{2,i,r}$ 2. Bildungsrate der Spezies i in der Reaktion r
- $v'_{i,r}$ stöchiometrischer Koeffizient des Edukts i in der r-ten Reaktion
- $v''_{i,r}$ stöchiometrischer Koeffizient des Produkts i in der r-ten Reaktion
- \hat{M}_i Molmasse des i-ten Reaktanden [mol/kg]
- A empirische Konstante; Wert 2
- B empirische Konstante; Wert 0,5
- ρ Dichte [kg/m³]
- ε Dissipationsrate der kinetischen Turbulenzenergie [m²/s³]
- k kinetische Turbulenzenergie [m²/s²]
- NE Laufindex über alle Edukte
- NP Laufindex über alle Produkte
- Y_i Massenbruch des Reaktanden i [-]

Wie beim Eddy-Break-Up-Modell ist der Umsatz grundsätzlich der Wirbeldissipationsrate ε/k proportional. Der erste Ausdruck beschreibt die Vermischungsgeschwindigkeit der Reaktanden, die als sofort chemisch umgesetzt gelten. Der zweite Ausdruck stellt sicher, dass die Reaktion nur dann abläuft, wenn die erforderliche Aktivierungsenergie zur Verfügung gestellt worden ist. Diese wird von den heißen Produkten der Verbrennung geliefert, die sich mit den kalten Edukten vermischen. Wenn Y_P null ist, also noch keine Verbrennung stattgefunden hat und damit keine Aktivierungsenergie zur Verfügung steht, nimmt $\dot{R}_{2,i,r}$ den Wert null an und lässt als kleinere der beiden Reaktionsraten die Reaktion nicht anspringen.

Ein großer Vorteil dieses Modells ist, dass es völlig ohne kinetische Reaktionsparameter auskommt, die daher für die CFD-Simulation der Reaktion nicht bekannt sein müssen, und nur einen geringen Rechenzeitbedarf hat. Daher wird es für viele CFD-Simulationen von Verbrennungsvorgängen mit schneller Kinetik eingesetzt [Liebe03.01].

2.5.2.3 Gleichzeitig kinetisch und Mischungskontrollierte Reaktionen

Eine Weiterentwicklung des Eddy-Dissipation-Modells ist das Eddy-Dissipation-Concept [Magnu91.01, Fluen06.01]. Dieses modelliert kleine Strukturen der Turbulenz, in denen die Reaktanden zuerst vermischt werden und anschließend kinetisch kontrolliert miteinander reagieren. Das Eddy-Dissipation-Concept ist daher gut zur Beschreibung von Reaktionen geeignet, bei denen - wie beim Calcinierungsprozess - starke Wechselwirkungen zwischen Turbulenz und Reaktionskinetik auftreten.

Für die Bildungsrate der i-ten Komponente in der r-ten Reaktion gilt:

$$\dot{R}_{i,r} = \frac{\rho \zeta^{*2}}{\tau^* [1 - \zeta^{*3}]} (Y_i^* - Y_i) \quad \text{Gleichung 2-51}$$

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

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

mit

ρ :	Dichte [kg/m ³]
τ^* :	Zeitmaßstab der Turbulenzstruktur [s]
C_τ :	Modellkonstante (0,4082)
ζ^* :	Längenmaßstab [m]
C_ζ :	Modellkonstante (2,1277)
Y_i^* :	Massenbruch der Spezies i nach dem Zeitschritt τ^* [-]
Y_i :	Massenbruch der Spezies i [-]
ε :	Dissipationsrate [m ² /s ³]
k :	kinetische Turbulenzenergie [m ² /s ²]
ν :	kinematische Viskosität [m ² /s]

Das Modell geht davon aus, dass die Reaktion in einem Volumen der Längenabmessung ζ^* reaktionskinetisch kontrolliert nach Gleichung 2-46 über den Zeitraum τ^* abläuft. Nach numerischer Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung, die den Speziesmassenbruch Y_i^* nach dem Zeitschritt τ^* ergibt, wird diese Größe Y_i^* in Gleichung 2-51 eingesetzt. Dieses Verfahren erhöht den Rechenaufwand gegenüber dem Eddy-Dissipation-Modell deutlich. Darüber hinaus ist das zu lösende Gleichungssystem sehr steif, so dass dessen numerische Lösung vielfach schwierig ist.

2.5.3 Beschreibung der NO_x-Bildung

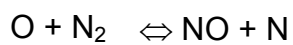
Die Stickoxidbildung ist ein verhältnismäßig komplexer Vorgang, dessen Kinetik und Mechanismen in hohem Maße abhängig sind vom Einsatzbrennstoff, den lokalen stöchiometrischen und thermischen Bedingungen des Verbrennungsvorgangs und den in größerer Anzahl auftretenden Zwischenprodukten.

Für die Darstellung der Grundlagen der Genese und des Abbaus von Schadstoffen sei auf die Literatur [Kreme86.01, Schul85.01] verwiesen. Hier wird nur auf die wesentlichen Zusammenhänge eingegangen.

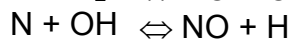
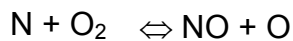
Bei Stickoxiden unterscheidet man nach ihrer Entstehungsgeschichte zwischen [Görne91.01]

- thermischen,
- Brennstoff- und
- prompten Stickoxiden.

Thermische Stickoxide entstehen bei hohen Temperaturen ab ca. 1200 °C [Scheu87.01, Garde84.01]. Bei dieser Temperatur liegen Sauerstoff und Stickstoff in dissoziierter, atomarer Form vor, wobei kinetisch kontrollierte Reaktionen der Form



Gleichung 2-52



auftreten (Zel' dovich-Mechanismus). Der geschwindigkeitsbestimmende Schritt ist dabei die Dissoziation des Stickstoffs.

Brennstoff-Stickoxide entstehen aus dem im Brennstoff enthaltenen organisch gebundenen Stickstoff. Etwa 50% des organischen Stickstoffs gelangen während der Brennstoff-Pyrolyse in die Gasphase, wobei im Wesentlichen NH_3 und HCN entstehen, die weiter zu NO reagieren [Görne91.01]. Der restliche Stickstoff verbleibt im Koks und wird im Verlauf des Koksabbrands ebenfalls bevorzugt zu HCN umgesetzt.

Prompte Stickoxide entstehen beim Angriff des Stickstoffs durch Kohlenwasserstoffradikale. Auch hier entstehen als Zwischenprodukt HCN -Verbindungen, die weiter zu NO_x reagieren. Die prompte NO_x -Bildung ist bei typischen Verbrennungssystemen nur zu etwa 5% an der Gesamt-Stickoxidbildung beteiligt und wird daher vielfach nicht berücksichtigt.

Da an der NO_x -Bildung zum einen eine größere Anzahl an Zwischenprodukten beteiligt ist, zum anderen die zu betrachtenden Umsetzungsreaktionen vielfach kinetisch kontrolliert sind, ist die Modellierung dieses Vorgangs relativ komplex und verlangt einen hohen rechnerischen Aufwand. Es wird daher vielfach auf vereinfachte semiempirische Globalkinetiken ausgewichen, die nachfolgend vorgestellt werden.

Der von De Soete [Soete74.01] vorgestellte Ansatz berücksichtigt einzig HCN als Zwischenprodukt und gründet auf experimentellen Untersuchungen an laminaren, flachen, mit Stickstoff verdünnten Ethylen/Sauerstoff-Vormischflammen im unter- und überstöchiometrischen Bereich für Flammentemperaturen zwischen 1800 und 2400 K. Dabei werden die Zwischenreaktionen von HCN zu NH_i als nicht geschwindigkeitsbestimmend angesehen und bleiben unberücksichtigt.

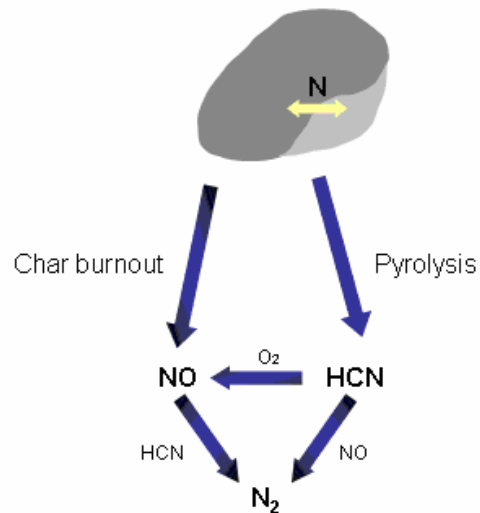


Abbildung 2-8: Reaktionspfade nach De Soete [Sever05.01, Sever05.02]

Reaktionspfade des NO_x-Modells nach De Soete:

Gleichung 2-53



Das Modell von Mitchell et al. [Mitch82.01] berücksichtigt in Erweiterung zu dem De-Soete-Modell die Zwischenreaktion von HCN zu NH₃. Die experimentelle Grundlage liefern Untersuchungen in einem Temperaturbereich von 1000 bis 1900 °C. Abbildung 2-9 zeigt die charakteristischen Reaktionspfade.

Stickoxid ist an der Reduktion zu HCN mittels Kohlenwasserstoffen, der Bildungsreaktion durch die Oxidation von NH₃ sowie dem Abbau zu elementarem Stickstoff mittels Ammoniak über mehrere Reaktionspfade beteiligt.

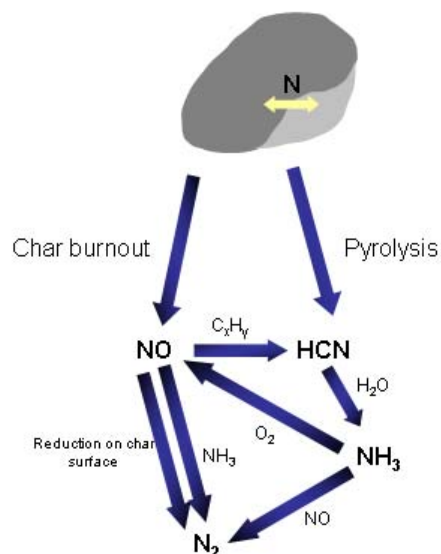
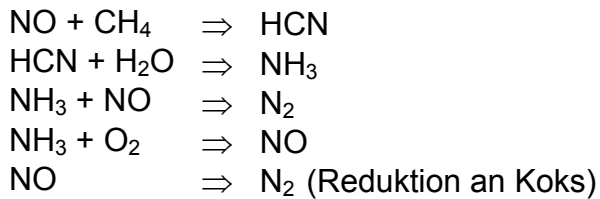


Abbildung 2-9: Reaktionspfade nach Mitchell [Sever05.01, Sever05.02]

Reaktionspfade des NO_x-Modells nach Mitchell:

Gleichung 2-54



Das Modell von Chen [Chen96.01] ist noch detaillierter und enthält alle wichtigen Reaktionspfade für die wesentlichen Gasphasenreaktionen, die zur Produktion und zum Abbau von NO beitragen.

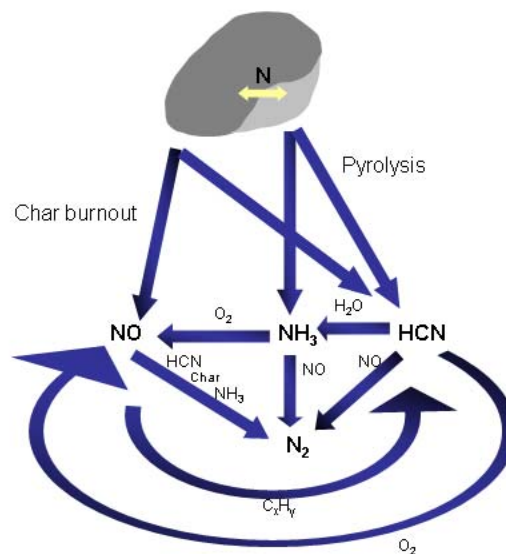
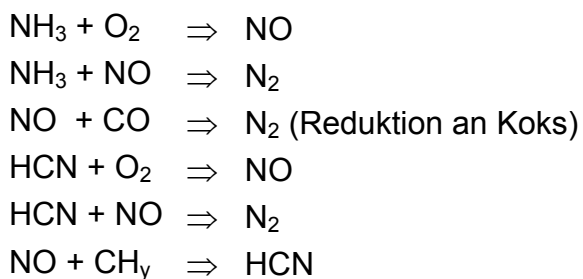


Abbildung 2-10: Reaktionspfade nach Chen [Sever05.01, Sever05.02]

Reaktionspfade des NO_x-Modells nach Chen:

Gleichung 2-55



3 Turbulenzmodulation durch die Partikelphase

3.1 Definition der Turbulenzmodulation durch Partikel

Als Turbulenzmodulation durch Partikel wird der Umstand bezeichnet, dass die Turbulenz einer beladenen Strömung unter bestimmten Bedingungen durch anwesende Partikel beeinflusst (moduliert) wird. Die Höhe der Beeinflussung hängt von der Beladung ab, wobei die Turbulenz durch die Partikel sowohl vermindert als auch erhöht werden kann.

3.2 Beschreibung der Mechanismen

In ihrem Übersichtsartikel über veröffentlichte Experimente zur Turbulenzmodulation haben Gore und Crowe [Gore89.01] den beobachteten Einfluss der Partikel auf die Gasphasenturbulenz zusammenfassend dargestellt. Bei den Experimenten wurden die turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen in Rohrströmungen und Freistrahlen mit Laser-Doppler-, Hitzdraht-, oder Phasen-Doppler-Anemometern vermessen.

Die Autoren definierten zum einen die Turbulenzdämpfung

$$\frac{I_{t,2p} - I_{t,1p}}{I_{t,1p}}, \quad \text{Gleichung 3-1}$$

mit

$I_{t,1p}$: turbulente Intensität der unbeladenen Strömung [-]
 $I_{t,2p}$: turbulente Intensität der beladenen Strömung [-]

zum anderen das Verhältnis der beiden Größenmaßstäbe

$$l_t = \frac{d_p}{l_e}.$$

mit

d_p : Partikeldurchmesser [m]
 l_e : turbulenter Längenmaßstab [m]

Die turbulente Intensität ist dabei wie folgt definiert:

$$I_t = \frac{\sqrt{\hat{u}^2}}{\bar{u}}. \quad \text{Gleichung 3-2}$$

mit

\hat{u} : Geschwindigkeitsfluktuation [m/s]
 \bar{u} : mittlere Strömungsgeschwindigkeit des Fluids [m/s]

Der turbulente Längenmaßstab ist für Rohrströmungen definiert als

$$l_e = 0,2 R. \quad \text{Gleichung 3-3}$$

mit

R: Rohrwandradius [m]

Bei Freistrahlen gilt:

$$l_e = 0,039 x.$$

Gleichung 3-4

mit

x: axiale Entfernung von der Strahlaustrittsebene [m]

Gore und Crowe stellten dabei fest, dass sich der Einfluss der Partikel auf die Turbulenz änderte, wenn das kritische Größenmaßstabsverhältnis

$$l_{t,krit} \approx 0,1.$$

Gleichung 3-5

erreicht wurde (Abbildung 3-1).

Bei einem Verhältnis kleiner 0,1, d. h. wenn die Partikel bedeutend kleiner als der turbulente Längenmaßstab waren, wurde die Gasphasenturbulenz durch die Partikelzugabe gegenüber der unbeladenen Strömung reduziert. Bei einem Verhältnis größer 0,1 vergrößerte sie sich dagegen bei Zugabe von Partikeln (Abbildung 3-1). Eine Beschreibung der Höhe der Turbulenzdämpfung bzw. -anregung in Abhängigkeit vom Längenverhältnis, war mit dieser Darstellung jedoch nicht möglich; sondern nur die Angabe, ob die Partikel die Turbulenz dämpfen oder erhöhen würden.

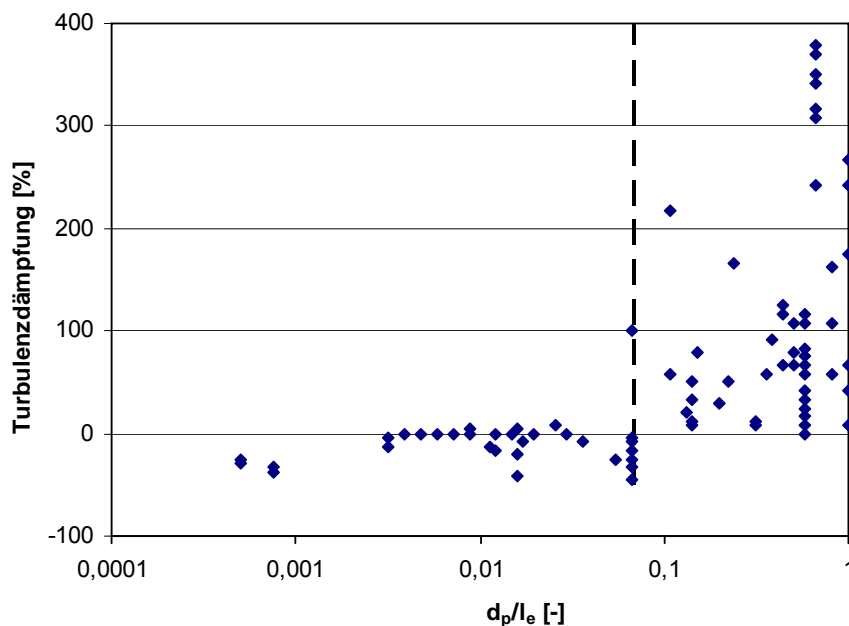


Abbildung 3-1: Turbulenzdämpfung in Abhängigkeit vom Verhältnis d_p/l_e [Gore89.01]

Kulick et al. [Kulic94.01] untersuchten eine voll ausgebildete Kanalströmung für mehrere Partikelarten experimentell und bestätigten das von Gore und Crowe definierte Verhältnis $d_p/l_e \approx 0,1$ für den Umschlag von Turbulenzdämpfung zu Turbulenzerhöhung.

Von Squires und Eaton [Squir90.01, Squir94.01] sowie Elghobashi und Truesdell [Elgho93.01] wurden DNS-Simulationen partikelbeladener Strömungen durchgeführt, die die experimentellen Ergebnisse tendenziell bestätigten. Auf Untersuchungen zur

Turbulenzmodulation mittels DNS-und LES-Simulation wird in Kapitel 3.4.2 eingegangen.

Eine Reihe von Autoren ([Gore98.01], [Crowe00.01], [Hetsr89.01], [Geiss01.01]) diskutiert Mechanismen, mit denen Partikel die Gasphasenturbulenz beeinflussen. Eine zusammenfassende Übersicht gibt [Geiss01.01]. Für die Beschreibung der Mechanismen werden die nachfolgend definierten Kennwerte verwendet:

Volumenanteil der dispersen Phase am Gesamtsystem, Φ_p :

$$\Phi_p = \frac{V_{Partikel}}{V_{Fluid} + V_{Partikel}} \quad \text{Gleichung 3-6}$$

mit

$V_{Partikel}$: Volumen der Partikel im betrachteten Volumenelement [m³]

V_{Fluid} : Volumen des Fluids im betrachteten Volumenelement [m³]

Die Partikelrelaxationszeit ist definiert als:

$$\tau_p = \frac{d_p^2 \rho_p}{18\eta} \quad \text{Gleichung 3-7}$$

mit

d_p : Partikeldurchmesser [m]

ρ_p : Partikeldichte [kg/m³]

η : dynamische Viskosität des Fluids [kg/(m s)]

Sie charakterisiert die Partikelträgheit und ist die Zeitkonstante, mit der ein Partikel auf eine Geschwindigkeitsänderung des umgebenden Fluids reagiert. Beträgt zur Betrachtungszeit $t = 0$ die Geschwindigkeit $v_{p,0}$ und die der umgebende Gasphase u_{Gas} , so nimmt das Partikel nach einer inhomogenen linearen Differentialgleichung erster Ordnung die Geschwindigkeit der Gasphase an. Die Zeitkonstante der Differentialgleichung ist dabei die Partikelrelaxationszeit nach Gleichung 3-7 (Abbildung 3-2).

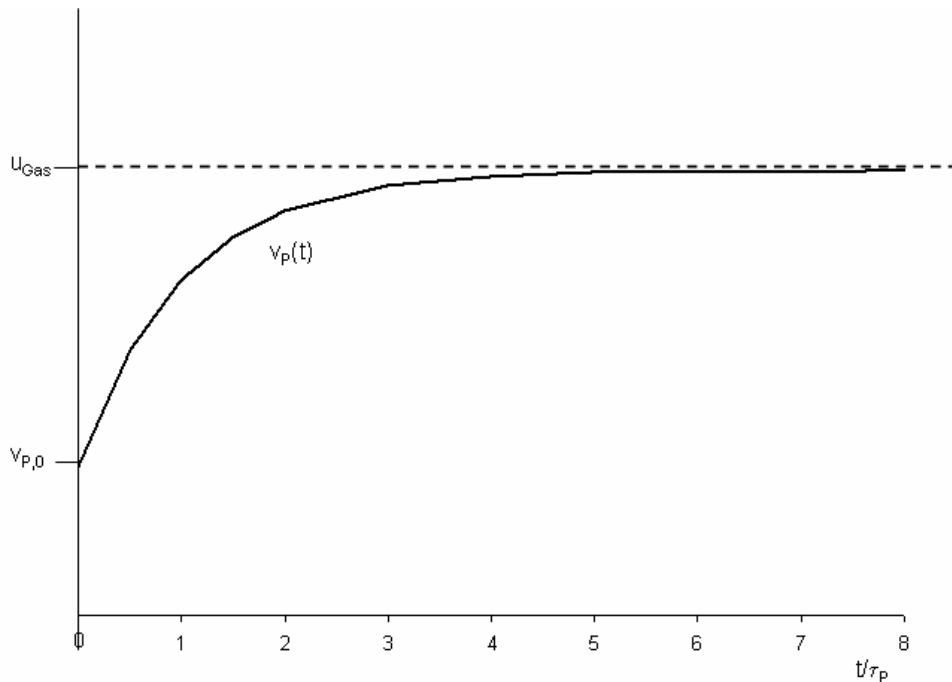


Abbildung 3-2: Geschwindigkeitsänderung eines Partikels nach einer inhomogenen linearen Differentialgleichung erster Ordnung.

Das Kolmogorov-Zeitmaß, die charakteristische Lebensdauer der kleinen Wirbel, beträgt

$$\tau_K = \left(\frac{\mu_t}{\varepsilon} \right)^{0,5} \quad \text{Gleichung 3-8}$$

mit

- μ_t : Wirbelviskosität [kg/(m s)]
- ε : Dissipationsrate [m²/s³]

Die Lebensdauer der großen Wirbel lässt sich abschätzen aus [Kohne97.01]:

$$\tau_e = \frac{l}{u_{RMS}} \quad \text{Gleichung 3-9}$$

mit

- l : Länge der großen Turbulenzwirbel [m]
- u_{RMS} : quadratischer Mittelwert der Geschwindigkeitsfluktuationen [m/s]

Die Länge der großen Turbulenzwirbel beträgt etwa das 0,001 - 0,1-fache des charakteristischen Apparatedurchmessers [Görne91.01].

Die turbulente Reynolds-Zahl ist definiert als

$$Re_t = \frac{u_{RMS} l}{\nu} \quad \text{Gleichung 3-10}$$

mit

- u_{RMS} : quadratischer Mittelwert der Geschwindigkeitsfluktuationen [m/s]
- l : charakteristische Apparateabmessung [m]
- ν : kinematische Viskosität des Fluids [m²/s]

Die Partikel-Reynoldszahl ergibt sich zu

$$\text{Re}_p = \frac{d_p (u - v) (\rho_p - \rho_f)}{\nu} . \quad \text{Gleichung 3-11}$$

mit

d_p :	Partikeldurchmesser [m]
u :	Fluidgeschwindigkeit [m/s]
v :	Gasgeschwindigkeit [m/s]
ρ_p :	Partikeldichte [kg/m ³]
ρ_f :	Fluidichte [kg/m ³]
ν :	kinematische Viskosität des Fluids [m ² /s]

Für die mit der Lebensdauer der großen Wirbel gebildete Partikel-Stokeszahl gilt

$$\text{St}_e = \frac{\tau_p}{\tau_e} . \quad \text{Gleichung 3-12}$$

mit

τ_p :	Partikelrelaxationszeit [s]
τ_e :	Lebensdauer der großen Turbulenzwirbel [s]

Dagegen ist die mit dem Kolmogorov-Zeitmaß gebildete Partikel-Stokeszahl definiert als:

$$\text{St}_K = \frac{\tau_p}{\tau_K} . \quad \text{Gleichung 3-13}$$

mit

τ_p :	Partikelrelaxationszeit [s]
τ_K :	Kolmogorov-Zeitmaß [s]

Aus Gleichung 3-10, Gleichung 3-12 und Gleichung 3-13 ergibt sich dabei die Beziehung

$$\frac{\tau_e}{\tau_K} = \text{Re}_t^{0,5} . \quad \text{Gleichung 3-14}$$

mit

τ_e :	Lebensdauer der großen Turbulenzwirbel [s]
τ_K :	Kolmogorov-Zeitmaß [s]
Re_t :	turbulente Reynoldszahl [-]

Als Mechanismen der Turbulenzmodulation sind u. a. zu nennen:

- Turbulenzdämpfung durch Übergang von kinetischer Turbulenzenergie aus der Gasphase auf kleine Partikel: Kleine Partikel haben eine geringe Trägheit und damit eine kleine Partikelrelaxationszeit. Sie reagieren daher entsprechend schnell auf Änderungen der Geschwindigkeit des sie umgebenden Fluids. Wenn ein hinreichend kleines Partikel sich lange genug in einem Turbulenzwirbel aufhält, wird es von diesem beschleunigt, entzieht dadurch

dem Wirbel kinetische Energie und reduziert so die Gasphasenturbulenz. Dieser Mechanismus ist bei St_e kleiner 1 relevant [Crowe96.01].

- Turbulenzerhöhung durch Impulsübertragung von großen Partikeln auf das sie umgebende Fluid: Die Bewegung großer Partikel wird von der Turbulenz nur wenig beeinflusst, die Partikel folgen der mittleren Strömungsbewegung. Beim Durchqueren eines Wirbels wird daher Impuls vom Partikel auf den Wirbel übertragen, wodurch die Gasphasenturbulenz erhöht wird. Als Maß für die Größe der Partikel wird auch hier die Partikel-Stokeszahl St_e herangezogen. Ist diese größer als 1, so wird von einer Turbulenzverstärkung durch Impulsübertragung vom Partikel auf das Fluid ausgegangen.
- Turbulenzerhöhung durch Turbulenzproduktion im Nachlauf großer Partikel [Crowe00.01]. Dieser Mechanismus wird ebenfalls für Partikel-Stokeszahlen St_e größer 1 unterstellt.
- Turbulenzerhöhung durch große Partikel infolge von Strömungsablösung: Nach Hetsroni [Hetsr89.01] tritt bei Partikel-Reynoldszahlen Re_p kleiner 110 an Kugeln niemals Strömungsablösung auf. Bei Experimenten von Aschenbach [Asche74.01] fand dagegen Strömungsablösung statt, wobei die Partikel-Reynoldszahl im Bereich von 400 bis 1000 lag. Hetsroni konnte anhand der Experimente zur Turbulenzmodulation von Tsuji et al. [Tsuji82.01, Tsuji84.01] nachweisen, dass bei diesen Experimenten die Partikel immer dann die Turbulenz erhöhten, wenn die Partikel-Reynoldszahl größer 400 war.
- Erhöhung der Turbulenz durch die Verdrängungswirkung der dispersen Phase: Hier sind zum einen erhöhte Geschwindigkeitsgradienten in der Trägerströmung zu betrachten, zum anderen die Störung der Gasphasen-Stromlinien durch die Partikel [Geiss01.01, Görne91.01].
- Turbulenzerhöhung durch interpartikuläre Kollisionen und Partikel-Wand-Interaktionen.

Art und Stärke des Partikeleinflusses werden häufig in einem Diagramm dargestellt, bei dem die Partikel-Stokeszahl St_e über den Volumenanteil Φ_p der dispersen Phase aufgetragen ist (Abbildung 3-3). In Abhängigkeit vom Wert beider Größen lassen sich verschiedene Bereiche identifizieren:

Der Volumenanteil Φ_p beschreibt die Stärke des Einflusses der diskreten Phase auf das Fluid. Bei Volumenanteilen unter 10^{-6} ist die Konzentration der Partikel so gering, dass die disperse Phase keinen nennenswerten Einfluss auf die Gasphase hat. Eine Berücksichtigung des Einflusses der Gasphase auf die Partikel ist ausreichend. Es besteht eine Ein-Weg-Kopplung.

Bei Volumenanteilen Φ_p zwischen 10^{-6} und 10^{-3} besteht eine Zwei-Wege-Kopplung, die disperse Phase und das Fluid beeinflussen sich gegenseitig, während interpartikuläre Effekte noch nicht dominant sind. Die Partikel-Stokeszahl bestimmt hier die Art der Turbulenzmodulation wie eingangs beschrieben.

Bei Volumenanteilen $\Phi_p > 10^{-3}$ sind die interpartikulären Effekte, primär Kollisionen, so stark, dass sie nicht mehr vernachlässigt werden dürfen. Da neben der Kopplung der beiden Phasen noch eine Kopplung zwischen den einzelnen Partikeln besteht, spricht man hier von einer Vier-Wege-Kopplung.

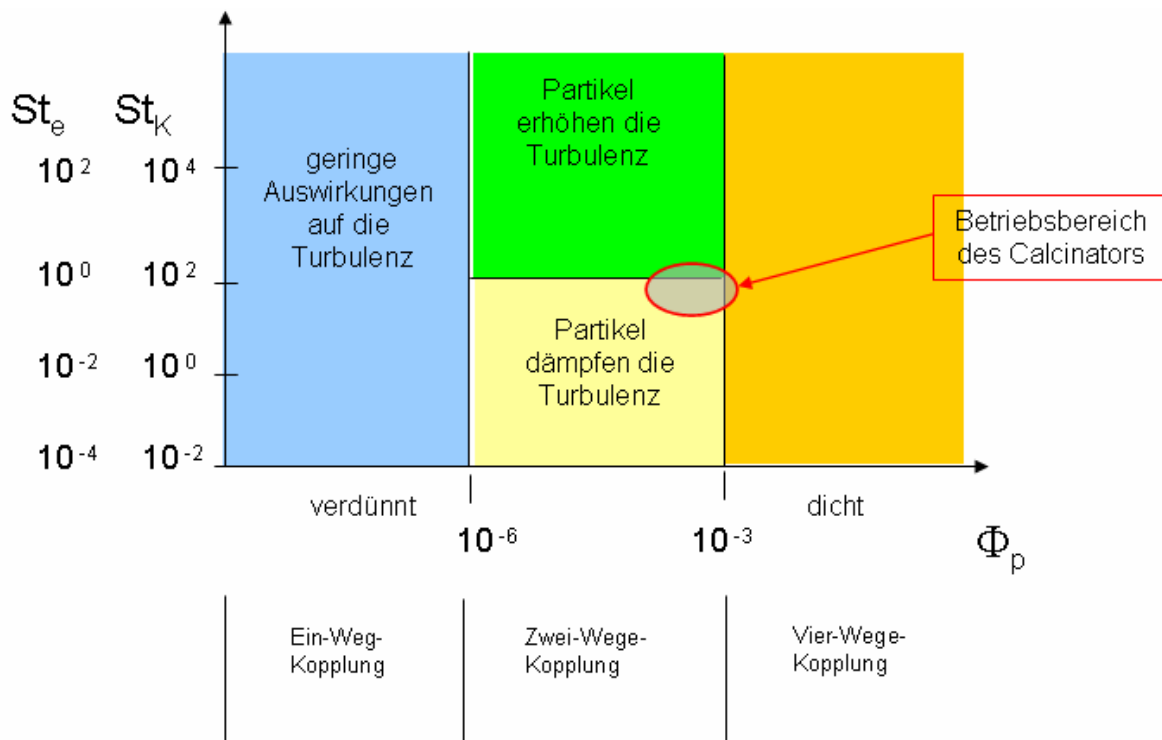


Abbildung 3-3: Einfluss von Partikeln auf die Turbulenzmodulation

Durch die Wechselwirkungen zwischen Partikeln und den Gasphasenwirbeln unterschiedlicher Größe ändert sich die Turbulenzstruktur der Wirbelkaskade. Daher kommt es zu einer Verschiebung des Energiespektrums. Erklärungsversuche hierzu wurden u. a. von Stojanović [Stoja04.01] und Sato [Sato96.01] unternommen. Sie argumentierten, dass bei der Turbulenzdämpfung die Partikel die Dissipationsrate im niederfrequenten Bereich erhöhen und daher dort weniger kinetische Turbulenzenergie produziert werde. In der Folge komme es zu einer Verschiebung des Energiespektrums in den hochfrequenten Bereich (Abbildung 3-4). Bei einer Turbulenzerhöhung werde durch Interaktionen zwischen großen Partikeln und großen Turbulenzstrukturen im Niederfrequenz-Bereich dort vermehrt kinetische Turbulenzenergie erzeugt, so dass nach Durchlaufen der Turbulenzkaskade im Hochfrequenz-Bereich verstärkte Dissipation auftrete (Abbildung 3-5).

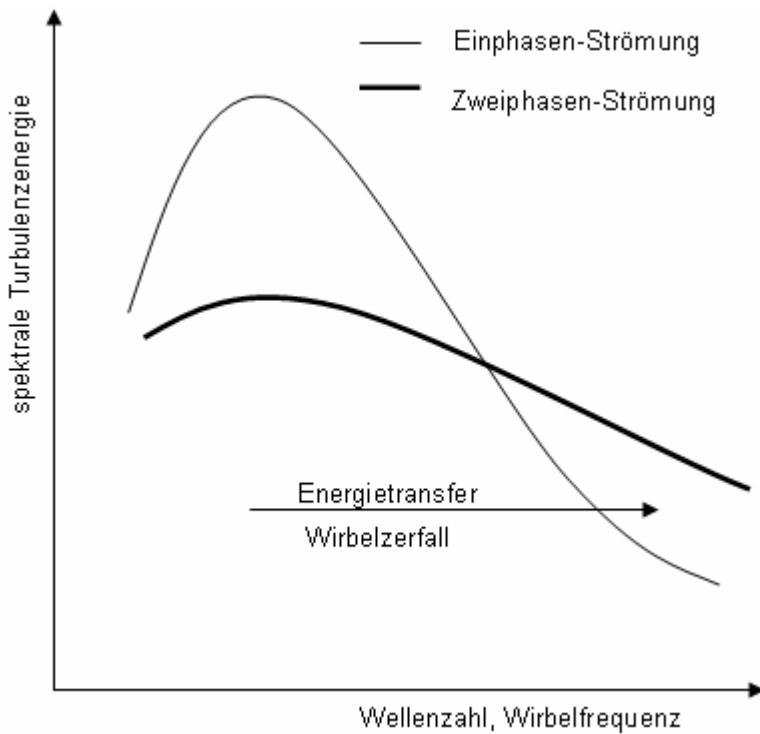


Abbildung 3-4: Turbulenzdämpfung durch kleine Partikel im Spektrum der kinetischen Turbulenzenergie [Sato96.01]

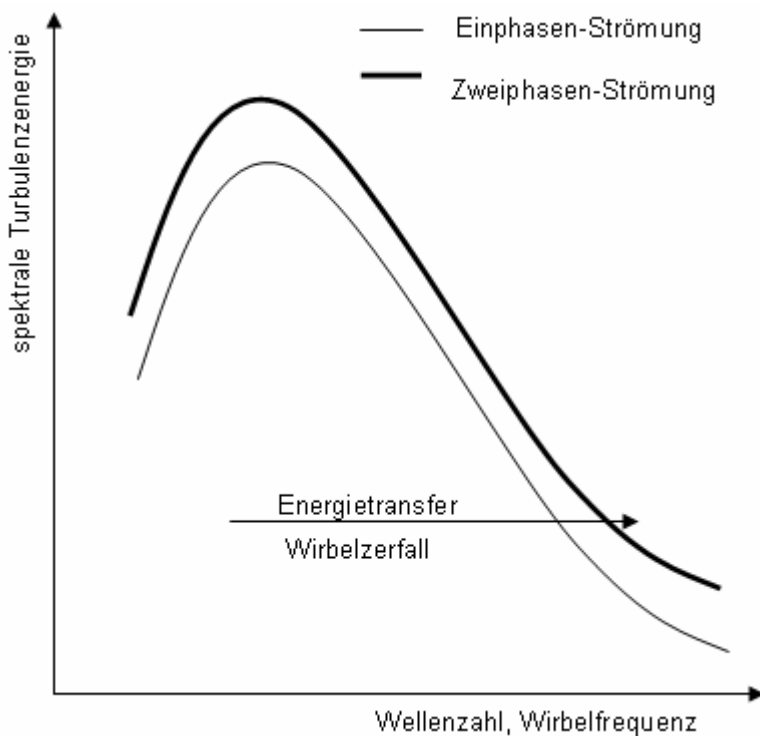


Abbildung 3-5: Turbulenzerhöhung durch große Partikel im Spektrum der kinetischen Turbulenzenergie [Sato96.01]

Bei den in Abschnitt 2.2.3 vorgestellten Turbulenzmodellen, die auf einer Reynolds-Mittelung der Navier-Stokes-Gleichungen beruhen, wird diese Turbulenzstruktur durch die skalaren Größen $\overline{u_i u_i}$, k und ε bzw. μ_t beschrieben. Diese sind integrale,

d. h. über das gesamte Frequenzspektrum gemittelte Größen, in denen zusätzliche Informationen über die Verschiebung des Energiespektrums nur mit vereinfachenden und einschränkenden Annahmen untergebracht werden können. Eine weitere erhebliche Erschwernis ist, dass viele Partikelphasen in technischen Systemen polydispers sind und die beschriebenen Mechanismen bei gleichzeitiger Anwesenheit von Partikeln unterschiedlicher Größen sich überlagern und interagieren. Bei polydispersen Systemen steigt der Modellierungsaufwand daher sehr schnell an.

Bei dem im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Vorcalciniervorgang liegt der Parameter St_k beim Kalkmehl im Bereich von 0,6 bis 60, bei der Kohle bei 0,1 bis 10. Der Parameter St_e hat fast immer einen Wert unter 1. Der Volumenanteil der dispersen Phase übersteigt nur in unmittelbarer Umgebung der Feststoffeinträge den Wert 10^{-3} . Damit liegt im Vorcalcinator größtenteils eine Zwei-Wege-gekoppelte Zweiphasenströmung vor, bei der die Turbulenz durch die Partikel gedämpft wird (Abbildung 3-2). Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird daher ausschließlich diese spezielle Form der Turbulenzmodulation betrachtet.

3.3 Bedeutung für den Calciniervorgang

Der Calciniervorgang ist stark vom Wärme- und Stoffhaushalt der endothermen Entsäuerung geprägt. Die durch den Brennstoffumsatz freigesetzte Energie wird von der Entsäuerung spontan aufgebraucht, so dass der Brennstoffabbrand nur zu einer geringen Temperaturerhöhung im Vorcalcinator führt [Boden03.01]. Eine notwendige Voraussetzung für den Entsäuerungsvorgang ist daher ein hinreichend schnell ablaufender Brennstoffabbrand. Dieser setzt eine gute Durchmischung der flüchtigen Kohlenbestandteile und des Luftsauerstoffs in der Flamme voraus. Die Durchmischung ist von der Gasphasenturbulenz abhängig. Da der Feststoffanteil im Bereich um Brenner und Kalkmehlaufgabe besonders hoch ist, ist dort die Beeinflussung der Gasphasenturbulenz durch den Feststoff ebenfalls hoch.

Der Brennstoffabbrand und die sich einstellenden lokalen Temperaturen und Spezieskonzentrationen beeinflussen außerdem den NO_x -Haushalt des Vorcalcinator, so dass auch ein starker Zusammenhang zwischen Turbulenz und NO_x -Emission besteht.

Außerdem wird die Dispersion der Partikel durch die Turbulenz beeinflusst: Schwere, große Partikel werden von dem sie umgebenden Potentialfeld (z. B. durch Schwerkraft, magnetische oder elektrostatische Kräfte) beeinflusst, das dem dispergierenden Einfluss der Turbulenz entgegenwirkt. Die Bewegung kleiner Partikel ist stärker von der örtlichen Turbulenz geprägt. Dies bedeutet, dass die Geschwindigkeit kleiner Partikel besser mit der örtlichen Gasphasen-Geschwindigkeit korreliert ist ("crossing trajectories effect", [Wells83.01]). Die erwünschte Dispersion der Partikel im Vorcalcinator verschlechtert sich daher infolge der Turbulenzmodulation.

3.4 Untersuchungen zur Turbulenzmodulation

3.4.1 Vorbemerkungen

Zur Turbulenzmodulation durch Partikel sind zahlreiche experimentelle und theoretische Untersuchungen durchgeführt und veröffentlicht worden. Die experimentellen Arbeiten beinhalten Messungen an einfachen Laborgeometrien wie Kanälen und Rohren, an denen der Einfluss der Partikel auf die Strömung, insbesondere die Turbulenz, erfasst wurde. Die theoretischen Arbeiten bestehen sowohl aus grundsätzlichen Überlegungen (z. B. [Owen69.01, Crowe96.01]) als auch numerischen Simulationen (z. B. [Squir90.01, Boule02.01, Sato96.01]).

Die wesentlichen Ergebnisse der Untersuchungen werden in den beiden nachfolgenden Unterkapiteln diskutiert. Die hierfür erforderlichen theoretischen Grundlagen werden in diesem Unterkapitel dargestellt.

Auch einfache Strömungen wie die unbeladene turbulente Rohrströmung werden durch die Wände beeinflusst. Die Axialgeschwindigkeit wird zum einen durch die Kontinuitätsgleichung bestimmt, zum anderen durch die Haftbedingung an der Wand, an der die Axialgeschwindigkeit null beträgt. Hierdurch bedingt bildet sich in der Rohrströmung das charakteristische parabolische Profil der Axialgeschwindigkeit aus, das in guter Näherung mit dem 1/7-Gesetz beschrieben werden kann:

$$\frac{u_{ax}(r)}{u_{ax,max}} = \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{\frac{1}{7}} \quad \text{Gleichung 3-15}$$

mit

$u_{ax}(r)$: axiale Strömungsgeschwindigkeit auf dem Radius r [m/s]

$u_{ax,max}$: axiale Geschwindigkeit auf der Rohrachse [m/s]

R : Rohrrinnenradius [m/s]

Da für Partikel, die von der Strömung mitgeführt werden, keine Haftbedingung an der Wand gilt, findet bei höheren Beladungen der Strömung im Wandbereich ein intensiver Impulsaustausch zwischen Fluid und Partikel statt. Der Gradient der Axialgeschwindigkeit des Fluids wird an der Wand hierdurch steiler, das Axialgeschwindigkeitsprofil pfropfenförmiger und aus Kontinuitätsgründen nimmt die maximale Axialgeschwindigkeit des Fluids auf der Rohrachse (bei konstantem Volumenstrom) ab. Diese Abnahme kann relativ groß sein, da ein großer Teil des Gesamtvolumenstroms durch das äußere Viertel des Rohrquerschnitts strömt. Aus diesen Gründen ist das 1/7-Gesetz bei höheren Beladungen nicht mehr gültig.

Sowohl bei beladenen als auch bei unbeladenen Strömungen treten an der Wand große Geschwindigkeitsgradienten auf, die eine erhöhte Turbulenzproduktion bewirken. Daher ist zu erwarten, dass die Turbulenz im Wandbereich am stärksten ist und zur Rohrmitte hin abnimmt. Bei einem hinreichend großen Rohrdurchmesser sollte die Strömung auf der Rohrachse unabhängig von den Randbedingungen, d. h. den Zuständen an der Wand, sein. Das Turbulenzprofil wird zusätzlich durch die Partikel beeinflusst, die die Produktions- und Dissipationsrate der kinetischen Turbulenzenergie verändern.

3.4.2 DNS- und LES-Simulationen zur Turbulenzmodulation

Es bietet sich an, DNS- und LES-Simulationen von partikelbeladenen Fluidströmen in einfachen Geometrien (z. B. Rohren, Kanälen) durchzuführen und mit solchen Simulationen theoretische Grundlagenuntersuchungen zur Turbulenzmodulation durchzuführen. Insbesondere können mittels der Ergebnisse aus solchen Simulationen die Modulationsmodelle für andere Turbulenzmodelle, z. B. für das k-ε-Modell, kalibriert werden.

LES-Simulationen einer vertikalen, partikelbeladenen Kanalströmung wurden u. a. von Li und McLaughlin [Li01.01] durchgeführt. Die Autoren untersuchten die Turbulenzmodulation durch Glas- und Kupferpartikel zwischen 21 und 39 µm Größe bei Massenbeladungen bis zu $m = 2$ kg/kg in einem vertikalen Kanal (Tabelle 3-1). Die Massenbeladung m eines Fluids ist dabei definiert als:

$$m = \frac{\dot{m}_p}{\dot{m}_f} \quad \text{Gleichung 3-16}$$

mit

- m : Beladung [-]
- \dot{m}_p : Massenstrom der Partikel [kg/s]
- \dot{m}_f : Massenstrom des Fluids [kg/s]

Obwohl die Massenbeladung eine dimensionslose Größe ist, ist es vielfach üblich, Massenbeladungen in der Dimension kg/kg anzugeben. Dies soll verdeutlichen, dass sich die Beladung auf Massenverhältnisse bezieht und nicht z. B. auf Volumen- [m³/m³] oder Molverhältnisse [mol/mol].

Fall	Material	Partikeldurchmesser [µm]	Beladung [kg/kg]
1	-	-	0
2	Glas	22	0,714
3	Glas	39	1,29
4	Glas	39	1,29
5	Kupfer	21	0,686
6	Glas	39	1,29
7	Glas	39	1,29
8	Glas	39	1,29
9	Glas	39	1,29

Tabelle 3-1: Übersicht über die bei den Simulationen verwendeten Materialien, Partikelgrößen und Beladungen [Li01.01]

Bei diesen Simulationen wurde die Erwartung bestätigt, dass mit zunehmender Beladung das Profil der Axialgeschwindigkeit zunehmend pfropfenförmiger wird (Abbildung 3-6). Sowohl bei beladener als auch bei unbeladener Strömung sind die axialen Fluktuationen die größten (Abbildung 3-7). Die Turbulenz ist im Wandbereich am stärksten und hat ihr Minimum auf der Kanalachse. Bei geringen Beladungen (im Bereich von 0,2 bis 0,4 kg/kg) werden die axialen Fluktuationen nur wenig durch die Partikel beeinflusst (Abbildung 3-7 links). Im Strömungskern sind sie bei beladener Strömung geringfügig größer als bei unbeladener (Abbildung 3-7 links).

Die Fluktuationen quer zur Strömungsrichtung werden schon bei diesen geringen Beladungen deutlich gedämpft.

Im Strömungskern wird die kinetische Turbulenzenergie - die in den Fluktuationen in alle Raumrichtungen enthaltene kinetische Energie - bereits bei diesen geringen Beladungen gedämpft. Bei einer höheren Beladung von 2 kg/kg, die etwa der globalen Beladung des Calcinators entspricht, werden die Fluktuationen in alle Richtungen gegenüber dem unbeladenen Fall deutlich gedämpft (Abbildung 3-7 rechts). Entsprechend stark ist hier die Abnahme der kinetischen Turbulenzenergie.

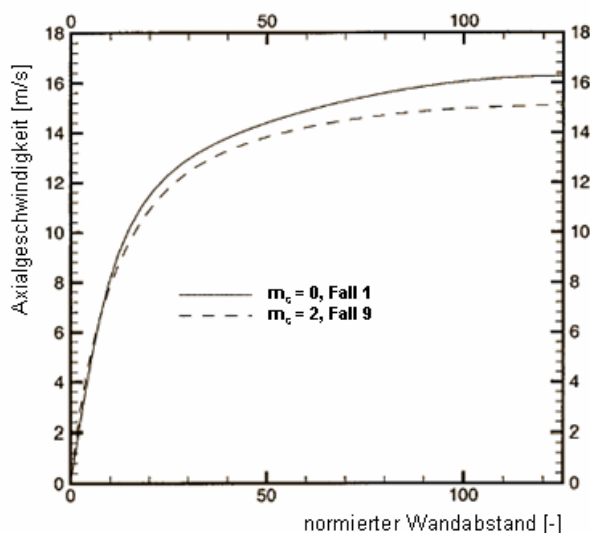


Abbildung 3-6: Einfluss der Beladung auf das Profil der Axialgeschwindigkeit, Beladung 0 bzw. 2 kg/kg [Li01.01]. Bezeichnung der Versuche nach Tabelle 3-1.

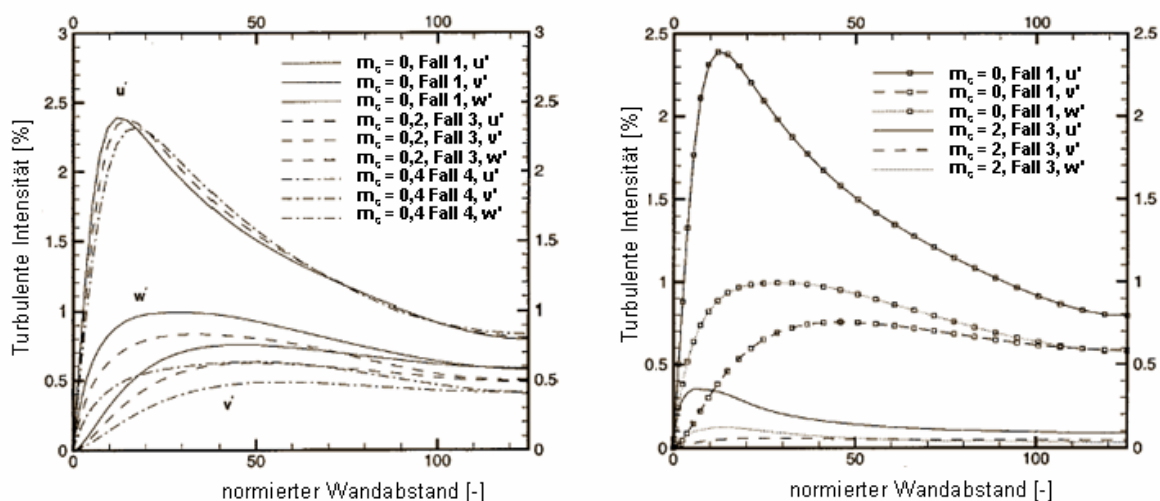


Abbildung 3-7: Einfluss der Beladung auf die Turbulenz-Intensität. Links: Beladung 0 bzw. 0,4 kg/kg. Rechts: Beladung 0 bzw. 2 kg/kg. u' : Intensität in axialer Richtung. Bezeichnung der Versuche nach Tabelle 3-1.

DNS-Simulationen partikelbeladener Strömungen mit Beladungen bis zu 1 kg/kg sind u. a. in [Squir90.01] dokumentiert. Mit zunehmender Beladung nahmen demnach kinetische Turbulenzenergie und Dissipationsrate laufend ab, bei einer Beladung von

1 kg/kg hatten beide Größen nur noch 50 bis 60 % des Wertes der unbeladenen Strömung.

3.4.3 Laborexperimente zur Turbulenzmodulation

Ergebnisse von Laborexperimenten zur Turbulenzmodulation in Rohrströmungen sind von verschiedenen Autoren veröffentlicht worden. Diese Messergebnisse wurden für die Validierung der in Abschnitt 3.5 vorgestellten Modelle benutzt. Die Experimente werden nachfolgend vorgestellt, auf die Validierung der Modelle wird in Abschnitt 3.6. eingegangen.

Das Anlagenschema einer typischen Laboranlage für solche Experimente ist in Abbildung 3-8 dargestellt. Kernstück des Versuchsaufbaus ist ein vertikal ausgerichtetes Rohr von mehreren Metern Länge und einem Durchmesser im Zentimeter-Bereich. Mittels eines Gebläses wird das Rohr mit Luft beaufschlagt. Im unteren Rohrbereich erfolgt eine Partikelzufuhr, mit der unterschiedliche Beladungen des Gasstroms im Rohr eingestellt werden können. Die Partikel durchlaufen das Rohr und werden über einen oder mehrere Kreislaufzyklone im System rezirkuliert. Im oberen Bereich des Rohres befinden sich die optischen Detektoren einer Laser-Doppler-Messvorrichtung, mit deren Hilfe die Gasgeschwindigkeiten über den Rohrradius in eine oder mehrere Raumrichtungen mit hoher zeitlicher Auflösung gemessen werden. Teilt man die gemessenen Geschwindigkeiten nach Gleichung 2-7 in einen zeitgemittelten und einen fluktuierenden Anteil auf, so lassen sich aus den fluktuierenden Anteilen die Reynolds-Spannungen und die kinetische Turbulenzenergie der Strömung berechnen. Durch Variation von Menge und Größe der in das Rohr eingebrachten Partikel lässt sich die Turbulenzmodulation in Abhängigkeit von Partikelgröße und Gasphasenbeladung indirekt messen.

Bei einem horizontal ausgerichtetem Rohr würden die Partikel sich infolge der Schwerkraft bevorzugt im Bereich der unteren Rohrwandung aufhalten, so dass bei einer solchen Versuchsanordnung keine über den Strömungsquerschnitt gleichmäßige Partikeldispersion erzielt werden könnte. Daher wird bei den Experimenten eine vertikale Anordnung gewählt, die die gewünschte gleichmäßige Partikeldispersion über den gesamten Strömungsquerschnitt ermöglicht.

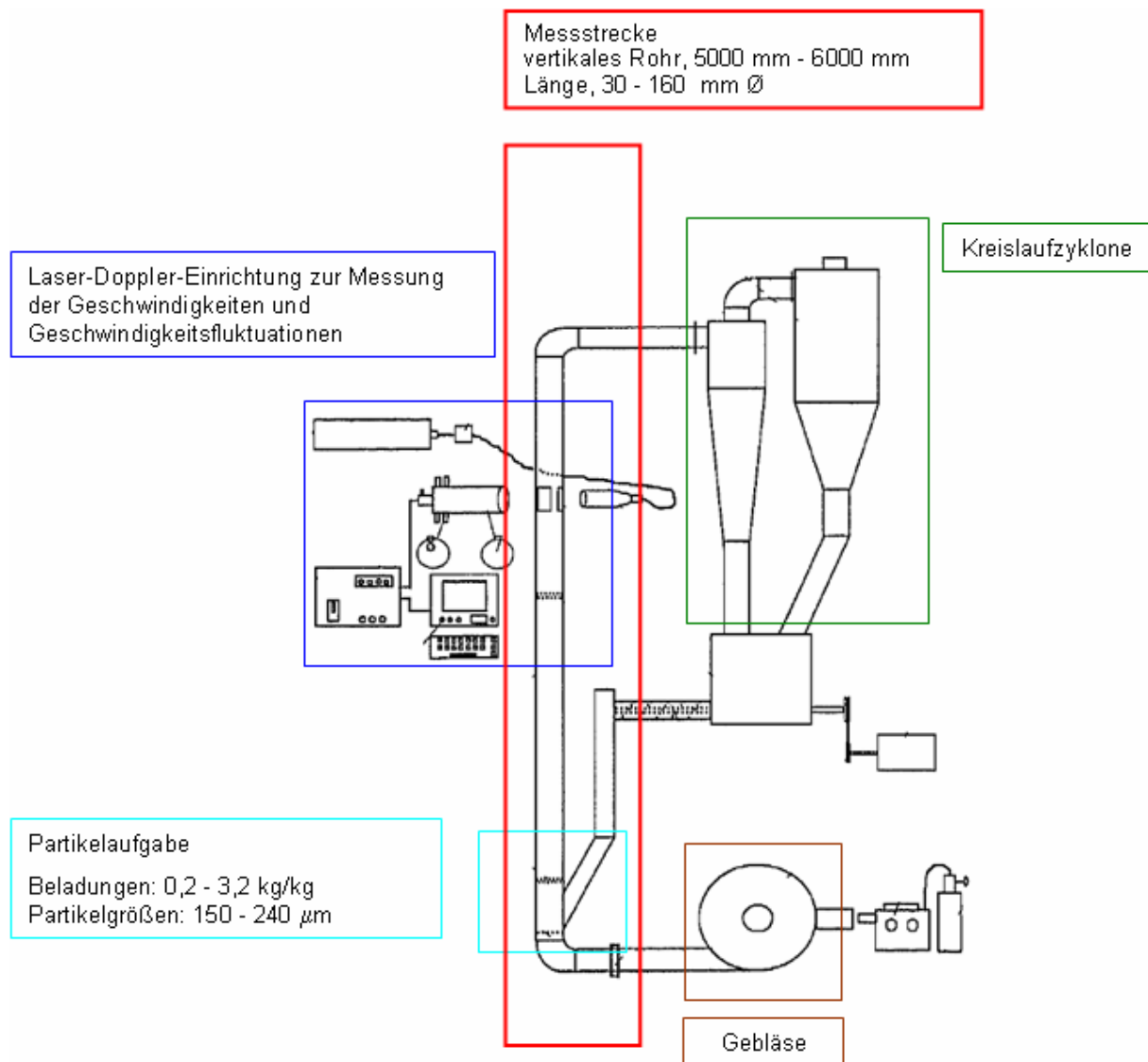


Abbildung 3-8: Schema einer Laboranlage für Experimente zur Turbulenzmodulation

Detaillierte Experimente zur Turbulenzmodulation in einem vertikalen Rohr wurden u. a. von Savolainen et al. [Savol98.01] mit Glaspartikeln durchgeführt. Es wurden sowohl die axialen als auch die radialen Geschwindigkeitsfluktuationen bestimmt, so dass die kinetische Turbulenzenergie direkt aus diesen berechnet werden kann. Wesentliche Versuchsparameter sind in Tabelle 3-2 zusammengefasst.

Beladung [kg/kg]	Korngröße [μm]	Partikeldichte [kg/m^3]	mittlere Leerrohrgeschwindigkeit [m/s]	Rohrdurchmesser [mm]	Rohrlänge [m]
0,0 bis 0,6	150	2200	12	164	ca. 5

Tabelle 3-2: Randbedingungen der Versuche von Savolainen [Savol98.01]

Nachfolgend werden die Ergebnisse der Untersuchungen dargestellt und diskutiert. In Abbildung 3-9 sind die axialen, in Abbildung 3-10 die radialen gemessenen Geschwindigkeitsfluktuationen über den Rohrradius dargestellt. Der laufende

Rohrradius r wurde dabei auf den Rohrrinnenradius r_0 normiert. Die Position $r/r_0 = 0$ bezeichnet die Rohrachse, $r/r_0 = 1$ die innere Rohrwand.

An der Rohrwand sind sowohl die axiale als auch die radiale Fluktuation am höchsten und nehmen zur Rohrachse hin ab. Das absolute Minimum beider Größen ist bei einer Beladung $m = 0 \text{ kg/kg}$ auf der Rohrachse. Für höhere Beladungen liegt das absolute Minimum der axialen Fluktuation bei etwa $r/r_0 = 0,25$; bei den radialen Fluktuationen bewirkt eine steigende Beladung, dass die Fluktuationen ab etwa $r/r_0 = 0,65$ zunehmend flacher verlaufen. Bei den radialen Fluktuationen ist der systematische Zusammenhang zwischen Beladung und Fluktuationsdämpfung sehr gut zu erkennen, bei den axialen hauptsächlich im Wandbereich ($r/r_0 > 0,7$). Im Bereich $r/r_0 \in]0,25/0,75]$ ist kein eindeutiger Zusammenhang zwischen Beladung und Dämpfung der axialen Fluktuation erkennbar, die Fluktuation des beladenen Gasstroms ist hier zum Teil kleiner, zum Teil auch größer als die des unbeladenen. Am Punkt $r/r_0 = 0,25$ sind die Fluktuationen der beladenen Ströme stets kleiner als die des unbeladenen, auf der Rohrachse ist es genau umgekehrt.

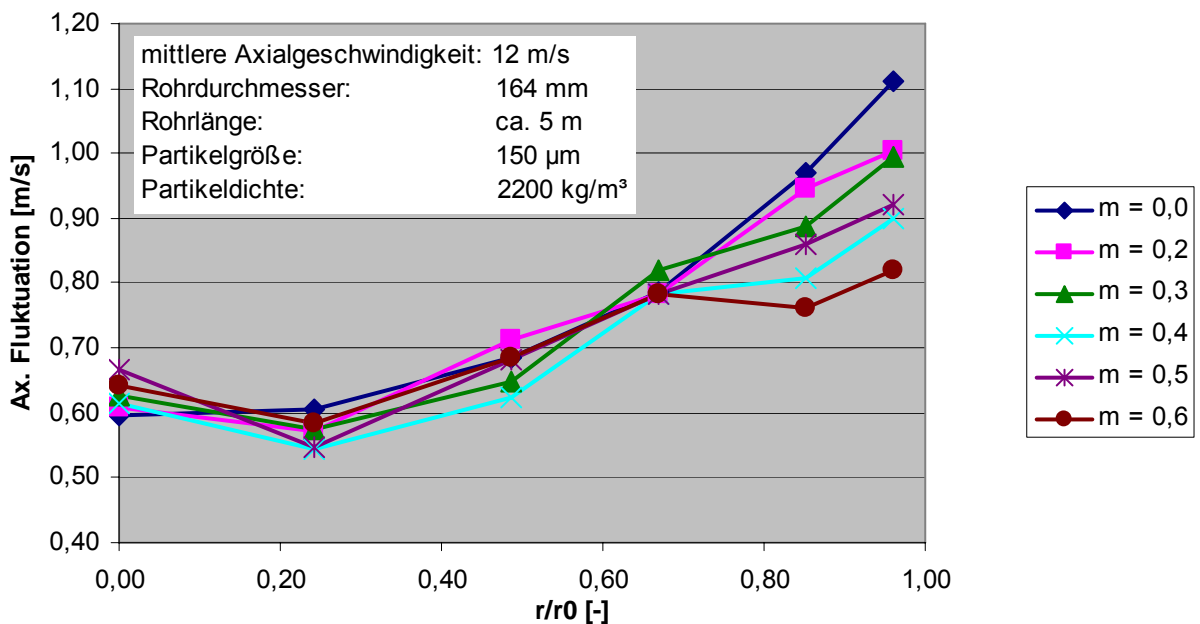


Abbildung 3-9: Axiale Geschwindigkeitsfluktuationen über den normierten Rohrradius [Savo198.01]

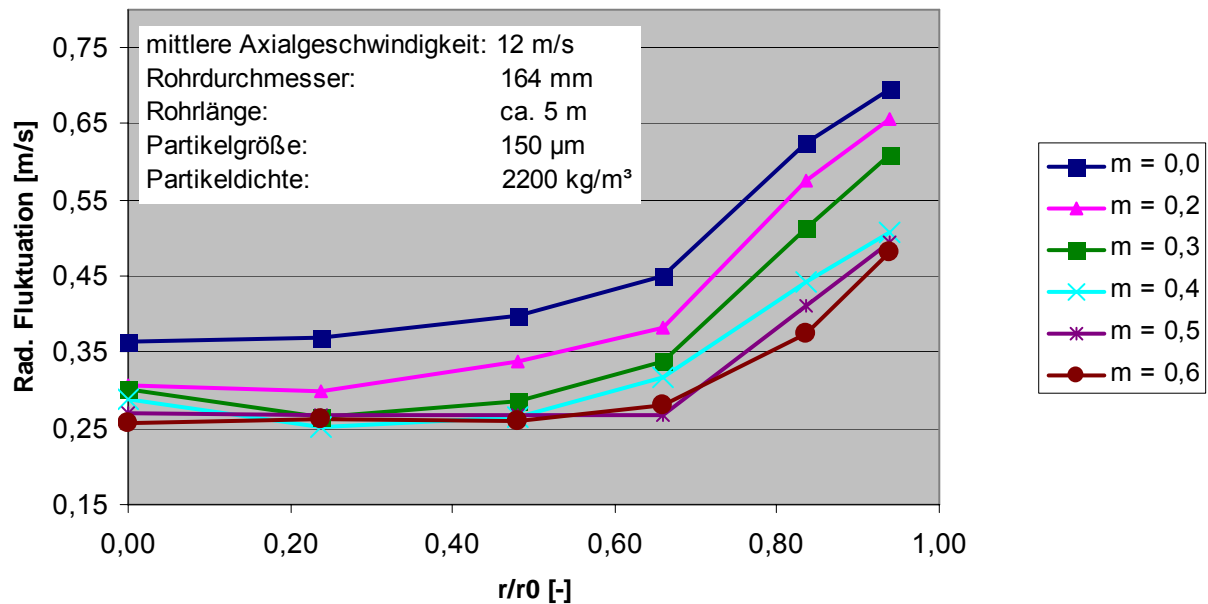


Abbildung 3-10: Radiale Geschwindigkeitsfluktuationen über den normierten Rohrradius [Savol98.01]

Betrachtet man nicht die Fluktuationen in die einzelnen Raumrichtungen separat, sondern deren zur kinetischen Turbulenzenergie zusammengefasste Summe, so ergibt sich ein übersichtlicherer Zusammenhang: Die kinetische Turbulenzenergie des beladenen Gasstroms ist stets - wie aus der Theorie zu erwarten - geringer als die des unbeladenen, wobei im untersuchten Bereich die Turbulenz mit zunehmender Beladung tendenziell abnimmt (Abbildung 3-11).

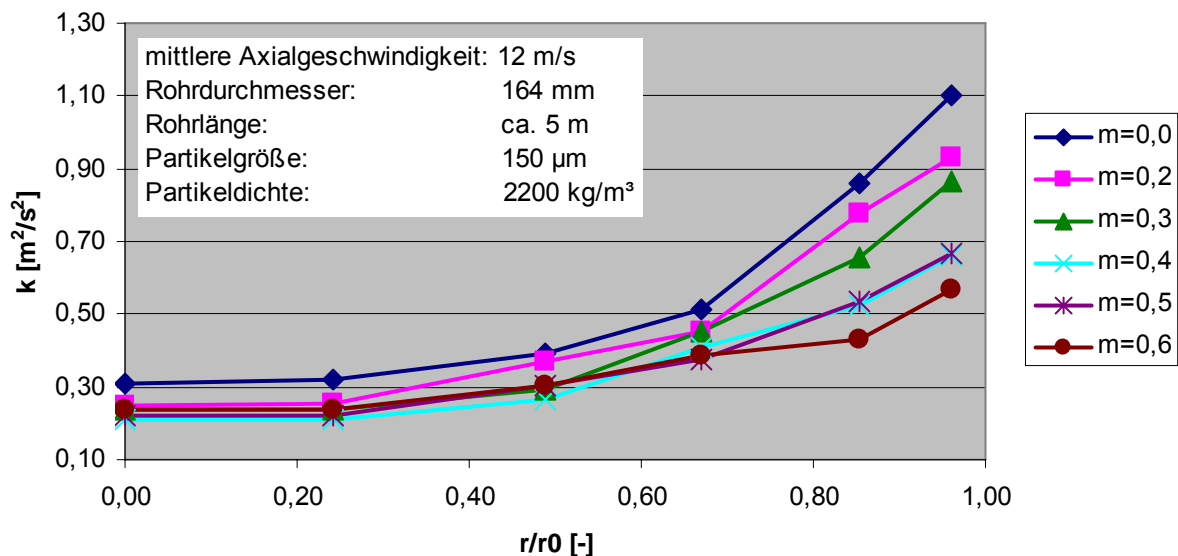


Abbildung 3-11: Kinetische Turbulenzenergie über den normierten Rohrradius [Savol98.01]

In Abbildung 3-12 ist das Verhältnis der radialen zur axialen Fluktuation bei den unterschiedlichen Beladungen dargestellt, die bei den experimentellen Untersuchungen eingestellt wurden.

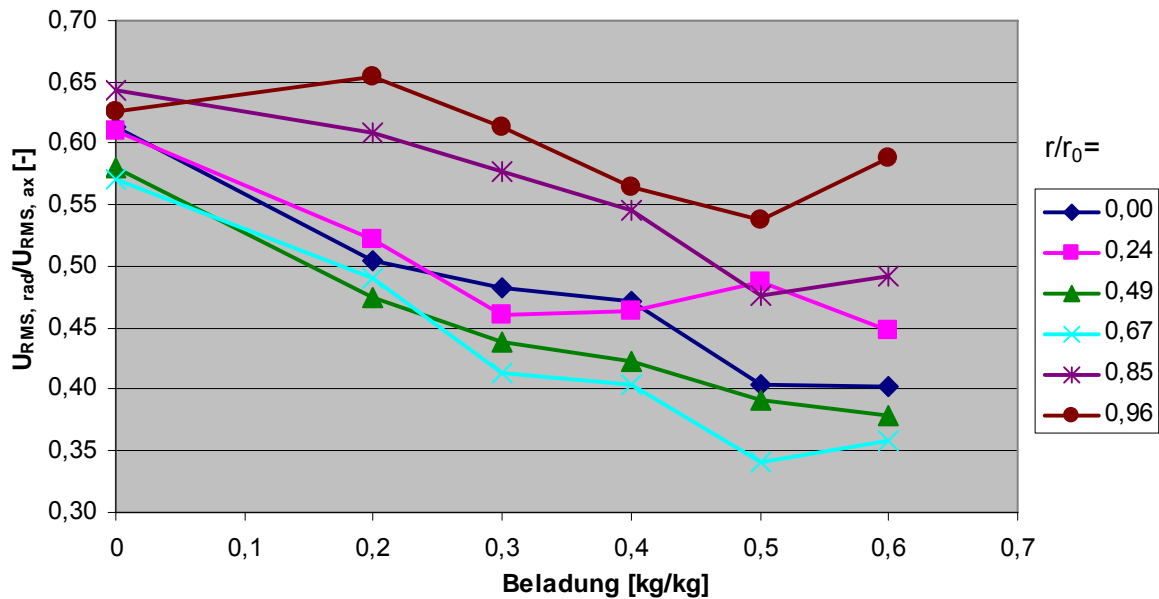


Abbildung 3-12: Einfluss der Beladung auf die Turbulenzisotropie [Savol98.01]

Erwartungsgemäß sind die axialen Fluktuationen stets größer als die radialen. Selbst auf der Rohrachse und bei unbeladener Strömung ist die Grundannahme des k - ϵ -Modells, die Isotropie der Turbulenz (vgl. Abschnitt 2.2.3.2), nicht vollständig erfüllt. Bei Turbulenzisotropie wäre das Verhältnis von radialer zu axialer Fluktuation stets eins. Mit wachsender Beladung nimmt die Turbulenz-Anisotropie zu. Dies steht in Einklang mit den in Abschnitt 3.4.2 vorgestellten DNS-Simulationen.

Die Ergebnisse dieser experimentellen Untersuchung sind mit einer gewissen Unsicherheit behaftet, da bei den Experimenten Glaspartikel verwendet wurden. Es besteht die Möglichkeit, dass sich wegen elektrostatischer Aufladung Partikelagglomerate gebildet haben, die die Turbulenz nur schwach dämpfen oder sogar erhöhen [Tsuji84.01, Gore 89.01]. Bei einer Beladung $m = 0,6$ ist die kinetische Turbulenzenergie an manchen Stellen geringfügig höher als bei Beladungen von 0,4 und 0,5 (Abbildung 3-11), was eventuell auf Partikelagglomeration zurückzuführen sein könnte.

Eine der wichtigsten und am häufigsten zur Validation von Modellen zur Turbulenzmodulation herangezogenen Veröffentlichungen ist die von Tsuji et al. [Tsuji84.01]. Dort wurden Beladungen zwischen 0 und 3,2 kg Feststoff/kg Gas bei Partikelgrößen zwischen 200 μm und 3000 μm untersucht. Während die größeren Partikel aufgrund ihrer großen Partikel-Stokeszahl die Turbulenz der Gasphase erhöhten, wurde bei den kleinen 200 μm -Partikeln beobachtet, dass die Turbulenz bei steigender Gasphasenbeladung deutlich sank. Diese Ergebnisse werden nachfolgend vorgestellt, Tabelle 3-3 fasst zunächst die wesentlichen Randbedingungen der Versuche zusammen.

Beladung [kg/kg]	Korngröße [μm]	Partikel-dichte [kg/m^3]	mittlere Leerrohr-geschwindigkeit [m/s]	Rohrdurch-messer [mm]	Rohrlänge [m]
0,0 bis 3,2	200	1020	ca. 9 ($m \geq 1,9$) ca. 11 ($m < 1,9$)	30,5	ca. 5

Tabelle 3-3: Randbedingungen der Versuche von Tsuji

Zu diesen Experimenten wurden auch die vermessenen Geschwindigkeitsverteilungen über den Rohrradius veröffentlicht (Abbildung 3-13). Während für Beladungen zwischen 0 und 1,3 kg/kg Gesamtvolumenstrom und Geschwindigkeitsverteilung nahezu konstant blieben, wurde das Geschwindigkeitsprofil bei Beladungen von 1,9 kg/kg und 3,2 kg/kg bedeutend flacher. Entsprechend nahm der Gasvolumenstrom ab.

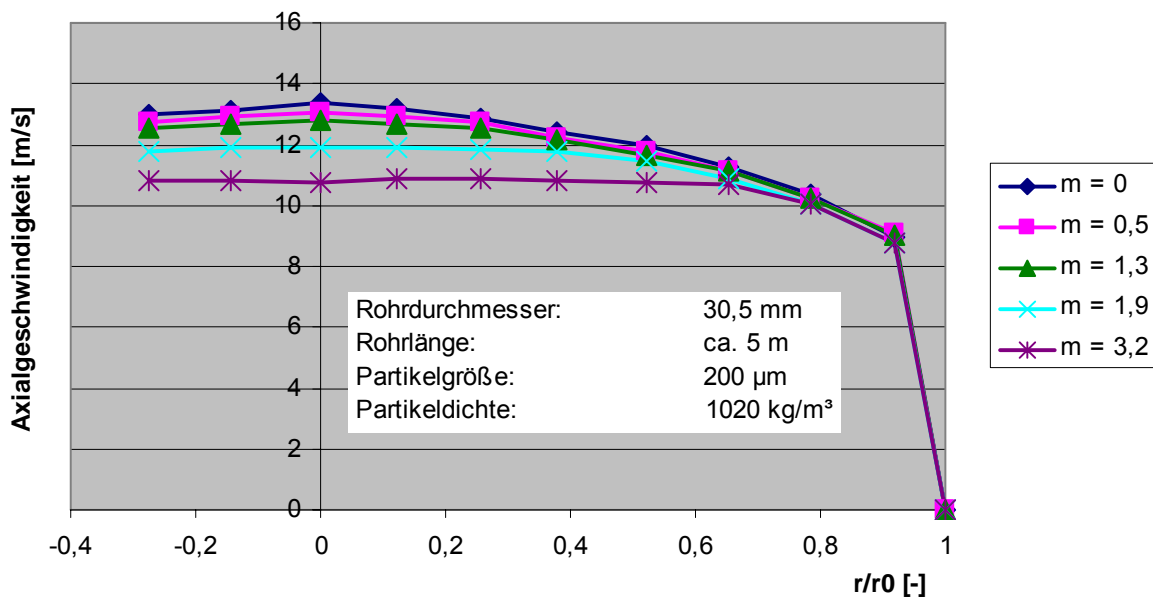


Abbildung 3-13: Axialgeschwindigkeitsprofile für unterschiedliche Partikelbeladungen [Tsuji84.01]

Bei den Geschwindigkeitsfluktuationen werden von den Autoren ausschließlich die axialen Fluktuationen angegeben (Abbildung 3-14), die radialen wurden bei der Berechnung der kinetischen Turbulenzenergie im Rahmen dieser Arbeit - u. a. anhand der diskutierten Ergebnisse von Savolainen - abgeschätzt. Da die axialen Fluktuationen die größten sind und somit den Hauptteil der kinetischen Turbulenzenergie enthalten, scheint dieses Vorgehen akzeptabel.

Der systematische Einfluss der Beladung auf die axiale Fluktuation ist gut erkennbar. Im Wandbereich nimmt die Fluktuation mit zunehmender Beladung ab. Wie bei den Experimenten von Savolainen liegt das Minimum der Kurven bei geringen Beladungen auf der Rohrachse, während es bei höheren Beladungen von der Achse fortwandert. Auffällig ist, dass für $m = 3,2$ die axialen Fluktuationen auf der Rohrachse fast bis auf das Niveau der unbeladenen Strömung ansteigen. Hier ist zu berücksichtigen, dass sich für Beladungen von 1,9 und 3,2 ein geringerer Volumenstrom als bei den anderen Beladungen ergab (Tabelle 3-3) und gleichzeitig das Strömungsprofil erheblich von dem bei den übrigen Beladungen abwich (Abbildung

3-13). Auf mögliche Ursachen für diese Phänomene gehen die Experimentatoren nicht ein. Da für die Experimente Polystyrolpartikel verwendet wurden, besteht die diskutierte Möglichkeit der Agglomeratbildung durch elektrostatische Aufladung. Bei Experimenten mit der nächstgrößeren untersuchten Partikelklasse von 500 μm statt 200 μm wurde bereits eine Turbulenzerhöhung festgestellt.

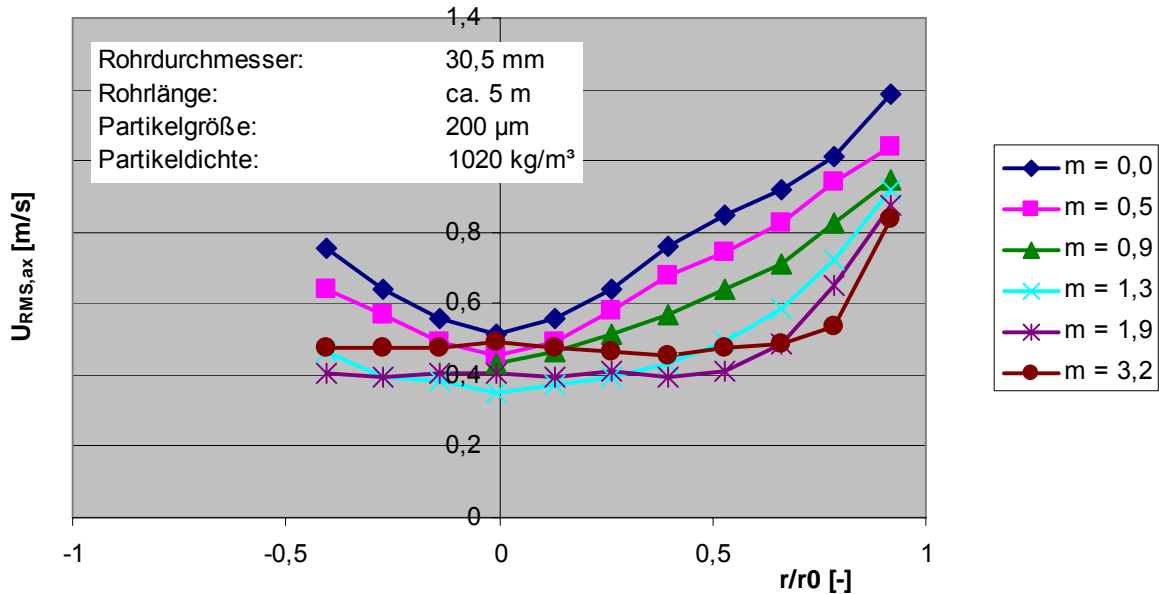


Abbildung 3-14: Axiale Fluktuationen bei unterschiedlichen Beladungen [Tsuji84.01]

Abbildung 3-15 zeigt den Verlauf der kinetischen Turbulenzenergie über den Rohrradius für unterschiedliche Beladungen. Es ist gut erkennbar, dass eine höhere Partikelbeladung der Gasphase eine Dämpfung ihrer Turbulenz bewirkt. Wie schon bei den Versuchen von Savolainen verschiebt sich das Minimum der kinetischen Turbulenzenergie bei höheren Beladungen von der Rohrachse in Richtung Außenwand.

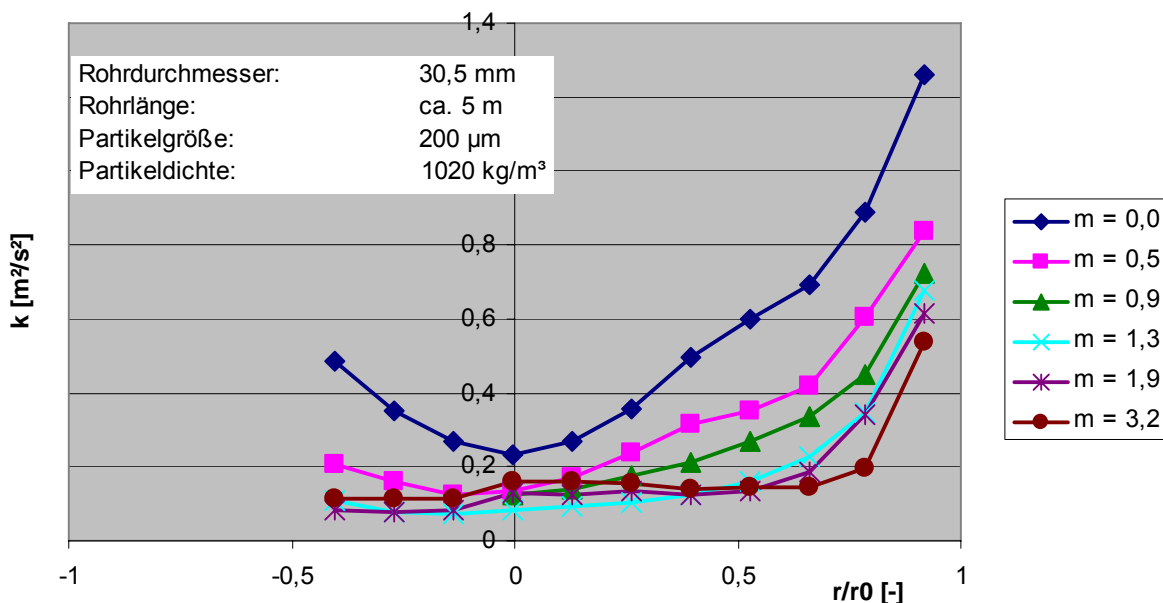


Abbildung 3-15: Kinetische Turbulenzenergie für unterschiedliche Beladungen [Tsuji84.01]

In Abbildung 3-16 ist der Einfluss der Beladung auf die Turbulenzdämpfung f dargestellt, wobei sowohl die Experimente von Savolainen als auch jene von Tsuji et al. berücksichtigt wurden. Die Turbulenzdämpfung ist definiert als

$$f = \frac{k_{unbeladen} - k_{beladen}}{k_{unbeladen}} \quad \text{Gleichung 3-17}$$

mit

$k_{unbeladen}$: kinetische Turbulenzenergie der unbeladenen Strömung auf der Rohrachse [m^2/s^2]

$k_{beladen}$: kinetische Turbulenzenergie der beladenen Strömung auf der Rohrachse [m^2/s^2]

Für die Beladung $m = 0,5$, die sowohl bei einem Experiment von Tsuji als auch bei einem Experiment von Savolainen eingestellt war, ergibt sich eine Turbulenzdämpfung von ca. 37 %. Da die von beiden Experimentatoren verwendeten Partikel eine ähnliche Relaxationszeit nach Gleichung 3-7 aufwiesen, war dies zu erwarten (Tabelle 3-4). Die Turbulenzdämpfung für die Beladung 0,6 im Experiment von Savolainen passt dagegen nicht zur Tendenz der Ergebnisse aus den Untersuchungen von Tsuji. Dies könnte auf die diskutierte Partikelagglomeration bei dem Experiment mit der Beladung 0,6 zurückzuführen sein.

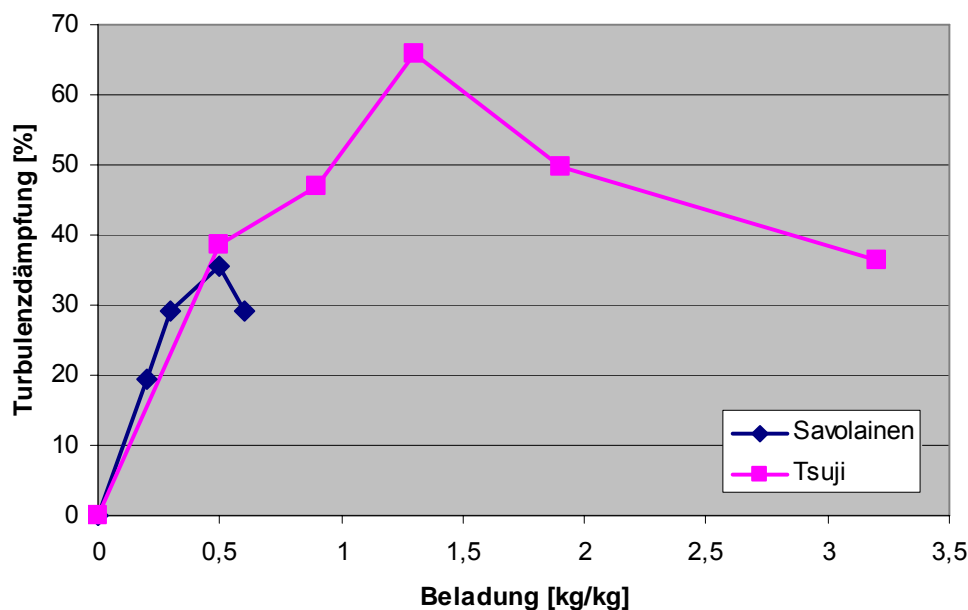


Abbildung 3-16: Einfluss der Partikelbeladung auf die Turbulenzdämpfung im Strömungskern

Experimentator	Savolainen	Tsuji et al.
Partikeldurchmesser [μm]	150	243
Partikeldichte [kg/m^3]	2250	1020
Gasviskosität [kg/ms]	$0,18 \cdot 10^{-6}$	$0,18 \cdot 10^{-6}$
Partikelrelaxationszeit nach Gleichung 3-7 [s]	0,15	0,19

Tabelle 3-4: Stoffdaten zur Bestimmung der Partikelrelaxationszeiten [Savol98.01], [Tsuji84.01]

Bei weiteren experimentellen Untersuchungen zur Turbulenzmodulation mit Luft oder Wasser als Fluidphase (z. B. [Zisse79.01], Maeda80.01]) wurde ebenfalls eine meist systematische Abnahme der Turbulenz mit zunehmender Partikelbeladung der Fluidphase festgestellt. Die zugrunde liegenden Experimente sind jedoch - anders als die vorgenannten - nicht so ausführlich dokumentiert, dass sie zur CFD-Simulation und Modellvalidierung geeignet sind. Die grundsätzliche Überlegung, dass hinreichend kleine Partikel die Gasphasenturbulenz im Strömungskern dämpfen, wird jedoch sowohl von diesen Untersuchungen als auch von den hier vorgestellten Arbeiten von Tsuji et al. und Savolainen bestätigt.

Im weiteren Verlauf der vorliegenden Arbeit wird daher untersucht, wie diese Turbulenzdämpfung bei der CFD-Simulation des Vorcalciniervorganges modelliert werden kann.

3.5 Math. Modelle zur Beschreibung mit dem k-ε-Modell

Beim k-ε-Modell für die Einphasenströmung erfolgt die Beschreibung der Turbulenz durch die Größen kinetische Turbulenzenergie (k) und Dissipationsrate der kinetischen Turbulenzenergie (ε). Deren Transportgleichungen lauten (vgl. Abschnitt 2.2.3.2):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad \text{Gleichung 2-11}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon u_j) = \quad \text{Gleichung 2-12}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon$$

Bei Verwendung des k-ε-Modells bestehen zwei Möglichkeiten, den turbulenzmodulierenden Einfluss der dispersen Phase zu berücksichtigen:

1. Durch Einführung eines zusätzlichen Quellterms für k (S_k , Gleichung 2-11) und ε (S_ε , Gleichung 2-12). Diese Vorgehensweise wird zunächst in Kapitel 3.5.1 erläutert.
2. Durch Modellierung der turbulenten Viskosität μ_t (Gleichung 2-11 und Gleichung 2-12). Auf diese Vorgehensweise wird anschließend in Kapitel 3.5.2 eingegangen.

Eine Übersicht über die im Rahmen der vorliegenden Arbeit untersuchten Quelltermmodelle gibt Tabelle 3-5, Tabelle 3-6 zeigt die untersuchten Viskositätsmodelle.

Urheber des Modells	Quellterm S_k	Quellterm S_ε	Abschnitt	Literaturstelle
Mostava und Mongia	$S_k = -\frac{2\rho_s \cdot \Phi_g \cdot \Phi_p \cdot k}{\tau_p} \left(1 - \frac{\tau_e}{\tau_e + \tau_p}\right)$	$S_\varepsilon = -\frac{2 \cdot C_{\varepsilon 3} \cdot \rho_s \cdot \Phi_g \cdot \Phi_p \cdot \varepsilon}{\tau_p} \left(1 - \frac{\tau_e}{\tau_e + \tau_p}\right)$	3.5.1.1	[Mosta88.1] [Hamil91.01]
Tu und Fletcher	$S_k = -2k \frac{\theta_p}{\tau_p} \left[1 - e^{-\frac{B_k \cdot \tau_p}{m \cdot \tau_i}}\right]$	$S_\varepsilon = -2\varepsilon \frac{\theta_p}{\tau_p} \left[1 - e^{-\frac{B_\varepsilon \cdot \tau_p}{m \cdot \tau_i}}\right]$	3.5.1.2	[Tu94.01] [Chen85.01]

Tabelle 3-5: Untersuchte Quelltermmodelle

Urheber des Modells	Turbulente Viskosität μ_t	Abschnitt	Literaturstelle
Owen	$\frac{\mu_t(m)}{\mu_t(m=0)} \approx [1+m]^{-1/2}$	3.5.2.1	[Owen69.01], [Zinse85.01]
Görner	$\frac{\mu_t(m)}{\mu_t(m=0)} \approx [1+m]^{-m/2}$	3.5.2.2	[Görne91.01]

Tabelle 3-6: Untersuchte Viskositätsmodelle

3.5.1 Quelltermmodelle

Grundlage dieser Modelle sind die Bilanzgleichungen für k und ε . Nach Reynolds-Dekomposition und anschließender Reynolds-Mittelung dieser Gleichungen (vgl. Abschnitt 2.2.2) treten für Zwei-Phasen-Strömungen gegenüber der Einphasen-Strömung zusätzliche Korrelationen auf. Dies ist darauf zurückzuführen, dass im Zwei-Phasen-Fall manche Fluktuationsgrößen - anders als bei der Einphasen-Strömung - nicht mehr den Wert null annehmen. Korrelationen höherer Ordnung werden häufig vernachlässigt, jene geringerer Ordnung müssen zur Schließung des Gleichungssystems modelliert werden [Chen85.01]. Die zusätzlichen Korrelations-terme werden in [Elgob83.02, Light04.01] ausführlich hergeleitet und diskutiert. Als zusätzlicher Quellterm ergibt sich für die k -Gleichung:

$$S_k = \overline{\hat{u}_i \hat{F}_{p,i}}$$

Gleichung 3-18

mit

\hat{u}_i : Fluktuation der Fluidgeschwindigkeit in Richtung i [m/s]

$\hat{F}_{p,i}$: fluktuierender Teil des zwischen Partikel und Fluid ausgetauschten Impulses [m kg/s²]

Unter der Annahme, dass das Partikel dem Stokes'schen Gesetz unterliegt, d. h. die Partikel-Reynoldszahl kleiner als 2 ist, ergibt sich für $\hat{F}_{p,i}$ [Light04.01]:

$$\widehat{F}_{p,i} = \frac{c}{\tau_p} (\widehat{u}_i - \widehat{v}_i) \quad \text{Gleichung 3-19}$$

mit

- c : Partikelkonzentration im Gasstrom [kg/m³]
- τ_p : Partikelrelaxationszeit [s]
- \widehat{u}_i : Fluktuation der Fluidgeschwindigkeit in Richtung i [m/s]
- \widehat{v}_i : Fluktuation der Partikelgeschwindigkeit in Richtung i [m/s]

Hieraus ergibt sich als Quellterm für k:

$$S_k = \frac{c}{\tau_p} (\overline{\widehat{u}_i \widehat{u}_i} - \overline{\widehat{u}_i \widehat{v}_i}). \quad \text{Gleichung 3-20}$$

mit

- c : Partikelkonzentration im Gasstrom [kg/m³]
- τ_p : Partikelrelaxationszeit [s]
- \widehat{u}_i : Fluktuation der Fluidgeschwindigkeit in Richtung i [m/s]
- \widehat{v}_i : Fluktuation der Partikelgeschwindigkeit in Richtung i [m/s]

Beim (hier ausschließlich betrachteten) k-ε-Modell gilt dabei infolge der Isotropie der Turbulenz

$$\overline{\widehat{u}_i \widehat{u}_i} = 2k, \quad \text{Gleichung 3-21}$$

mit

- \widehat{u}_i : Fluktuation der Fluidgeschwindigkeit in Richtung i [m/s]
- k : kinetische Turbulenzenergie der Fluidphase [m²/s²]

während diese Korrelationen beim RSM-Modell aus den transportierten Reynolds-Spannungen berechnet werden können. Die erforderliche Modellierung beschränkt sich damit für die k-Gleichung auf den Term $\overline{\widehat{u}_i \widehat{v}_i}$.

Für die ε-Gleichung ergibt sich als zusätzlicher Quellterm:

$$S_\varepsilon = -2\nu \overline{\frac{\partial \widehat{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \widehat{F}_{p,i}}{\partial x_j}}. \quad \text{Gleichung 3-22}$$

mit

- ν : kinematische Viskosität [m²/s]
- \widehat{u}_i : Fluktuation der Fluidgeschwindigkeit in Richtung i [m/s]
- $\widehat{F}_{p,i}$: fluktuierender Teil des zwischen Partikel und Fluid ausgetauschten Impulses [m kg/s²]
- x_j : Raumrichtung j [m]

Mit Verwendung von Gleichung 3-19 ergibt sich schließlich:

$$S_\varepsilon = -\frac{2}{\tau_p} c \left[\nu \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \hat{v}_i}{\partial x_j} \right) \right]$$

Gleichung 3-23

mit

- τ_p : Partikelrelaxationszeit [s]
- c : Partikelkonzentration im Gasstrom [kg/m³]
- \hat{u}_i : Fluktuation der Fluidgeschwindigkeit in Richtung i [m/s]
- \hat{v}_i : Fluktuation der Partikelgeschwindigkeit in Richtung i [m/s]
- x_j : Raumrichtung j [m]
- ν : kinematische Viskosität [m²/s]

Unterschiedliche Annahmen bei der Modellierung von Gleichung 3-20 und Gleichung 3-23 führen zu unterschiedlichen zusätzlichen Quelltermen in der k- und ε -Gleichung. Diese werden nachfolgend vorgestellt.

3.5.1.1 Modell von Mostafa, Mongia, Hamill und Malin

Mostafa und Mongia [Mosta88.01] geben als Korrelation zwischen der Gas-Partikel-Relativgeschwindigkeit und der Gasphasengeschwindigkeits-Fluktuation den Ausdruck

$$\overline{\hat{u}_i (\hat{u}_i - \hat{v}_i)} = 2k \left(1 - \frac{\tau_e}{\tau_e + \tau_p} \right)$$

Gleichung 3-24

an. Nach einigen Umformungen lassen sich hierfür folgende Quellterme für k und ε modellieren [Hamil91.01]:

$$S_k = -\frac{2\rho_p \Phi_f \Phi_p k}{\tau_p} \left(1 - \frac{\tau_e}{\tau_e + \tau_p} \right)$$

Gleichung 3-25

$$S_\varepsilon = -\frac{2C_{\varepsilon 3} \rho_p \Phi_f \Phi_p \varepsilon}{\tau_p} \left(1 - \frac{\tau_e}{\tau_e + \tau_p} \right)$$

Gleichung 3-26

mit

- ρ_p : Partikeldichte [kg/m³]
- Φ_f : Volumenanteil der Fluidphase [-]
- Φ_p : Volumenanteil der Partikelphase [-]
- τ_p : Partikelrelaxationszeit [s]
- τ_e : Wirbellebensdauer [s]
- k : kinetische Turbulenzenergie [m²/s²]
- ε : Dissipationsrate von k [m²/s³]
- $C_{\varepsilon 3}$: Modellkonstante, Wert 1,0

Die Größe der Quellterme ist vom Verhältnis der Wirbellebensdauer zur Partikelrelaxationszeit abhängig, Modelle dieser mathematischen Form werden daher als Verhältnis-Modelle bezeichnet.

Für die empirische Konstante $C_{\varepsilon 3}$ geben Hamill und Malin [Hamil91.01] den Wert 1,0 an. Die Validierung erfolgte mittels Messergebnissen von partikelbeladenen Freistrahlsströmungen. Die Autoren erzielten für diese Strömungskonfiguration eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Zur Beschreibung von Rohrströmungen scheint das Modell nur bedingt geeignet zu sein (vgl. Abschnitt 3.6).

3.5.1.2 Modell von Chen, Wood, Tu und Fletcher

Tu und Fletcher [Tu94.01] modellieren die Fluktuationsgrößen nach einem Ansatz von Chen und Wood [Chen85.01]. Dabei ergeben sich als zusätzliche Quellterme:

$$S_k = -2k \frac{c}{\tau_p} \left[1 - e^{\frac{-B_k \cdot \tau_p}{m^n \cdot \tau_e}} \right] \quad \text{Gleichung 3-27}$$

$$S_\varepsilon = -2\varepsilon \frac{c}{\tau_p} \left[1 - e^{\frac{-B_\varepsilon \cdot \tau_p}{m^n \cdot \tau_e}} \right]. \quad \text{Gleichung 3-28}$$

mit

- c : Konzentration der Partikelphase [kg/m³]
- τ_p : Partikelrelaxationszeit [s]
- τ_e : Wirbellebensdauer [s]
- m : Gasstrombeladung [-]
- n : empirische Konstante, $n = \begin{cases} 0 & \text{für } m \leq 1 \\ 1 & \text{für } m > 1 \end{cases}$
- B_k : Modellkonstante, Wert 0,009
- B_ε : Modellkonstante, Wert 0,4
- k : kinetische Turbulenzenergie [m²/s²]
- ε : Dissipationsrate von k [m²/s³]

Aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit der Quellterme vom Verhältnis aus Wirbellebensdauer und Partikelrelaxationszeit werden Ansätze dieser Form als Exponential-Modelle bezeichnet.

Die Anpassung der Konstanten erfolgte durch Auswertung von Experimenten an Rohrströmungen. Die Urheber des Modells weisen darauf hin, dass sowohl Verhältnis- als auch Exponentialmodelle für partikelbeladene Freistrahlen gute Ergebnisse liefern, für Rohrströmungen jedoch vielfach nicht. Dies wird auf ungünstig gewählte Modellkonstanten zurückgeführt. Tu und Fletcher weisen darauf hin, dass für $B_k = 0,5$ ihr Exponentialmodell die gleichen Ergebnisse liefert wie das Verhältnismodell von Mostafa und Mongia.

Interessant ist in diesem Zusammenhang das Ergebnis einer von Tu und Fletcher durchgeführten Sensitivitätsanalyse für den sinnvollen möglichen Wertebereich der

Modellkonstanten B_k , der mit [0,001/0,5] angegeben wird. Der turbulente Freistrahls mit $B_k = 0,5$ liegt damit an einem Extrempunkt des Modells.

3.5.2 Viskositätsmodelle

In den Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (vgl. Gleichung 2-8) tritt die turbulente Viskosität μ_t auf. Während die laminare Viskosität eine Stoffkonstante ist, die im Newton'schen Spannungsansatz die laminaren Schubspannungen mit dem Geschwindigkeitsgradienten verknüpft, ist die turbulente Viskosität von der örtlichen Turbulenzstruktur der Strömung abhängig. Sie geht auf Prandtl zurück, der für die turbulenten Spannungen $\tau_t = -\rho \overline{\hat{u}_i \hat{u}_j}$ einen Ansatz einführte, der die Geschwindigkeitsfluktuationen mit der mittleren Wirbelabmessung l_m und dem Gradienten der mittleren Geschwindigkeit $\frac{\partial \bar{u}}{\partial x_i}$ verknüpfte [Görne91.01]:

$$\hat{u}_i \sim \hat{u}_j \sim l_m \frac{\partial \bar{u}}{\partial x_i} \quad \text{Gleichung 3-29}$$

Hieraus ergibt sich für die turbulente Strömung der Boussinesq-Spannungsansatz

$$\tau_t = \mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial x_i} \quad \text{Gleichung 3-30}$$

Er gleicht formal dem für die laminare Strömung gültigen Newton'schen Spannungsansatz. Da die turbulente Viskosität die vollständige Information über die Turbulenzstruktur beinhaltet, ist ihre Modellierung entscheidend für die Qualität der Turbulenzbeschreibung.

Bei Einphasenströmungen wird die turbulente Viskosität μ_t zumeist mit der Prandtl-Kolmogorov-Beziehung modelliert:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad \text{Gleichung 3-31}$$

mit

- ρ : Fluiddichte [kg/m³]
- k : kinetische Turbulenzenergie [m²/s²]
- ε : Dissipationsrate der kinetischen Turbulenzenergie [m²/s³]

Hierbei ist C_μ eine Modellkonstante, deren allgemein anerkannter Wert bei 0,09 liegt. Dieser Wert wurde mittels Computeroptimierung bestimmt [Görne91.01]. Beim Standard-k- ε -Modell wird die turbulente Viskosität meist mit der Prandtl-Kolmogorov-Beziehung modelliert.

Bei den nachfolgend beschriebenen Viskositätsmodellen zur Beschreibung der Turbulenzmodulation wird die Prandtl-Kolmogorov-Beziehung (Gleichung 3-31) um einen Korrekturfaktor erweitert, der den Einfluss der dispersen Phase auf die Turbulenz berücksichtigt.

3.5.2.1 Modell von Owen

Für Stokes-Zahlen ≤ 1 leitet Owen [Owen69.01] eine Beziehung her, die auf einer Betrachtung der von einem Wirbel an einem kleinen Partikel verrichteten Arbeit beruht. Für das Verhältnis der Geschwindigkeitsfluktuationen der beladenen und unbeladenen Strömung leitete er folgende Beziehung her:

$$\frac{\hat{u}_{RMS}(m)}{\hat{u}_{RMS}(m=0)} = \frac{\mu_t(m)}{\mu_t(m=0)} \approx [1+m]^{1/2} \quad \text{Gleichung 3-32}$$

mit

- \hat{u}_{RMS} : zeitgemittelter quadratischer Mittelwert der Geschwindigkeitsfluktuation [m/s]
- μ_t : turbulente Viskosität [kg/m s]
- m : Beladung des Gasstroms [kg/kg]

Damit kann die turbulente Viskosität der partikelbeladenen Strömung berechnet werden. Bei größeren Partikeln, die der Turbulenz aufgrund ihrer Trägheit nur bedingt folgen, schlägt er folgende Beziehung vor:

$$\frac{\hat{u}_{RMS}(m)}{\hat{u}_{RMS}(m=0)} = \frac{\mu_t(m)}{\mu_t(m=0)} \approx \left[1 + m \frac{\tau_e}{\tau_p} \right]^{-1/2}. \quad \text{Gleichung 3-33}$$

mit

- τ_e : Wirbellebensdauer [s]
- τ_p : Partikelrelaxationszeit [s]

Für das Verhältnis τ_p/τ_e verwendet Zinser [Zinse85.01] die von Corrsin [Corrs63.01] hergeleitete Beziehung:

$$\frac{\tau_p}{\tau_e} = 0,478 \frac{d_p^2 \rho_p \varepsilon}{\eta k}. \quad \text{Gleichung 3-34}$$

mit

- d_p : Partikeldurchmesser [m]
- ρ_p : Partikeldichte [kg/m³]
- η : dynamische Viskosität [kg/(m s)]
- k : kinetische Turbulenzenergie [m²/s²]
- ε : Dissipationsrate [m²/s³]

3.5.2.2 Modell von Görner

Görner [Görne91.01] weist darauf hin, dass mit steigender Beladung der Einfluss der Partikelphase überproportional ansteigt, und schlägt in Anlehnung an Gleichung 3-32 folgenden heuristischen Ansatz vor [Görne88.01]:

$$\frac{\hat{u}_{RMS}(m)}{\hat{u}_{RMS}(m=0)} = \frac{\mu_t(m)}{\mu_t(m=0)} \approx [1+m]^{-m/2}. \quad \text{Gleichung 3-35}$$

mit

- \hat{u}_{RMS} : quadratischer Mittelwert der Geschwindigkeitsfluktuation [m/s]
- μ_t : turbulente Viskosität [kg/(m s)]
- m : Beladung des Gasstroms [kg/kg]

Diese Beziehung wurde durch Messungen an einem partikelbeladenen turbulenten Freistrahlfeld mit einer Partikelgröße von 40 µm gewonnen. Für eine Massenbeladung < 6 kg/kg stimmten die so berechneten Profile der Geschwindigkeitsfluktuationen tendenziell gut mit den Messungen überein.

3.6 Beurteilung der Modelle mittels experimenteller Daten

Die Validierung der vorgestellten Modulationsmodelle erfolgte mit den in Abschnitt 3.4.3 vorgestellten Experimenten zur Turbulenzmodulation in Rohren. Hierzu wurden die vorgestellten Modulationsmodelle für den CFD-Code FLUENT[®] implementiert, die Experimente unter Verwendung dieser Modelle simuliert und die Simulationsergebnisse den Messwerten für die kinetische Turbulenzenergie gegenübergestellt. Die Experimente decken den Beladungsbereich von 0,2 bis 3,2 kg Feststoff/kg Gas ab.

In den folgenden Abbildungen (Abbildung 3-17 bis Abbildung 3-25) ist die kinetische Turbulenzenergie für unterschiedliche Beladungen über der mit dem Rohrradius normierten radialen Koordinate des Rohrs dargestellt ($r/r_0 = 0$: Rohrachse, $r/r_0 = +/-1$: innere Rohrwand). Die CFD-Rechnungen erfolgten mit dem Standard-k-ε-Modell unter Verwendung der Prandtl-Kolmogorov-Beziehung (Bezeichnung: Std.-k-ε) nach Gleichung 3-31, den Quelltermmodellen nach Tu und Fletcher (Bezeichnung: Tu/Fletcher) nach Gleichung 3-27 und Gleichung 3-28 bzw. Hamill und Malin (Bezeichnung: Hamill/Malin) nach Gleichung 3-25 und Gleichung 3-26, sowie den Viskositätsmodellen nach Görner (Bezeichnung: Görner), Gleichung 3-35, bzw. Owen und Corrsin (Bezeichnung: Owen/Corrsin), Gleichung 3-33.

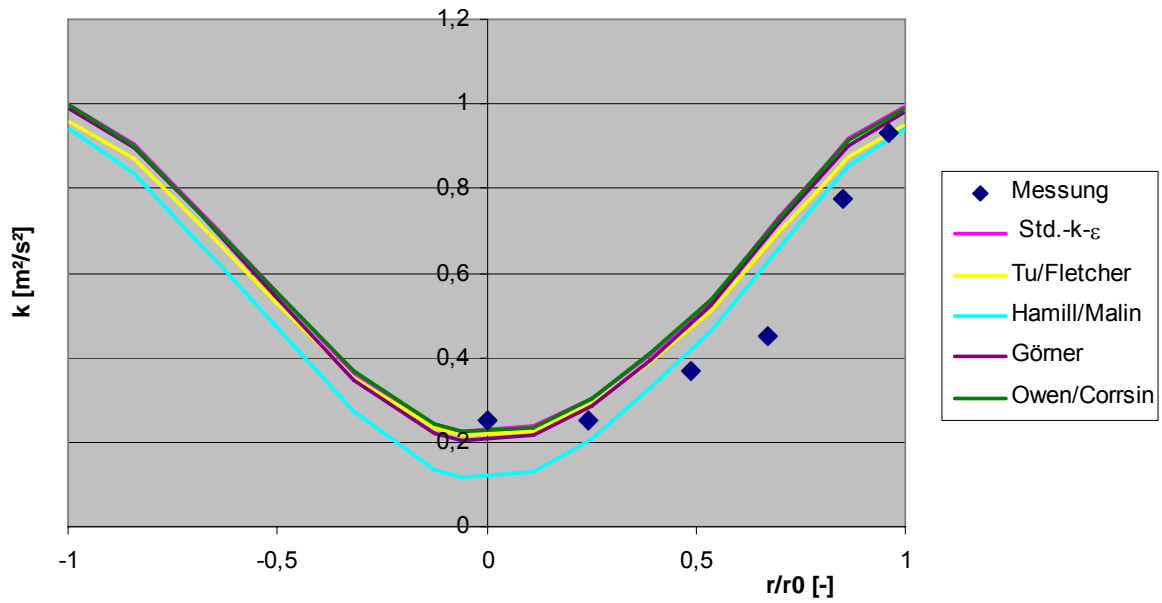


Abbildung 3-17: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 0,2 kg/kg [Savol98.01]

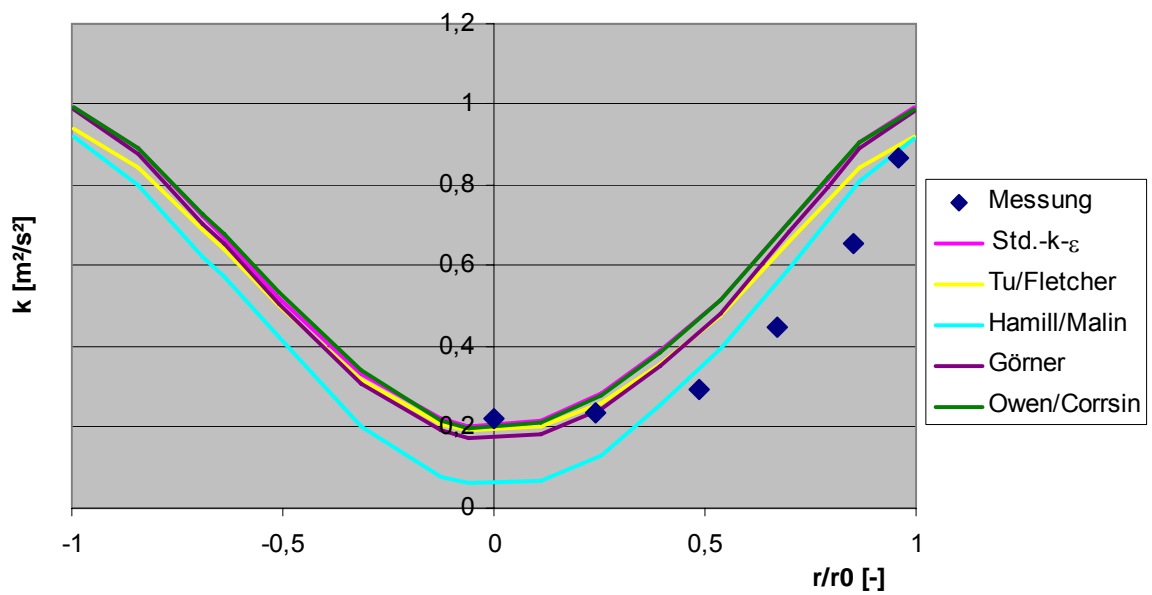


Abbildung 3-18: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 0,3 kg/kg [Savol98.01]

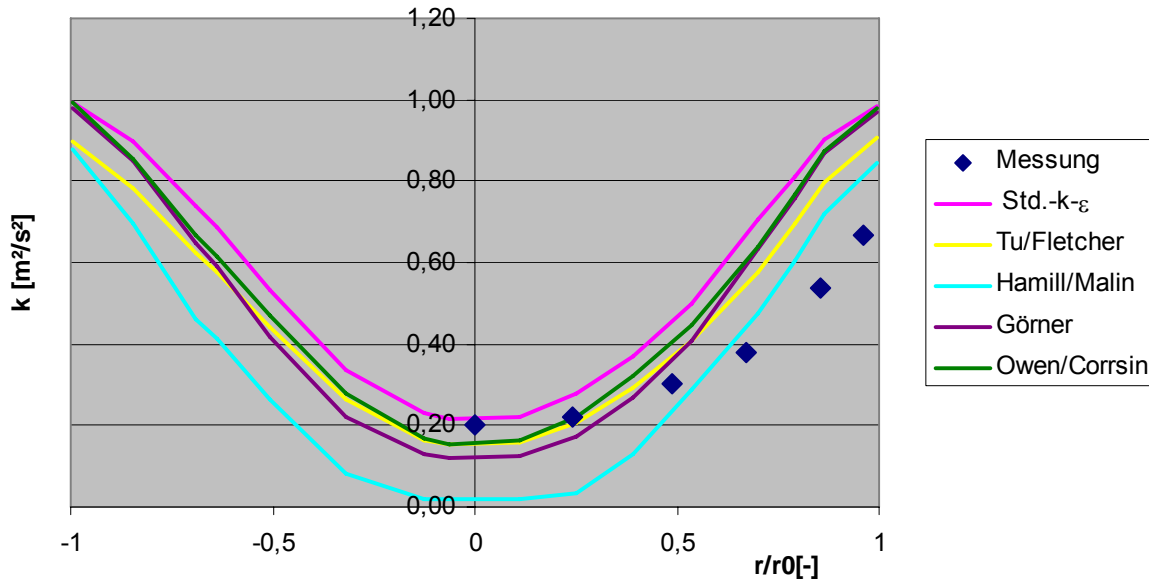


Abbildung 3-19: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 0,5 kg/kg [Savol98.01]

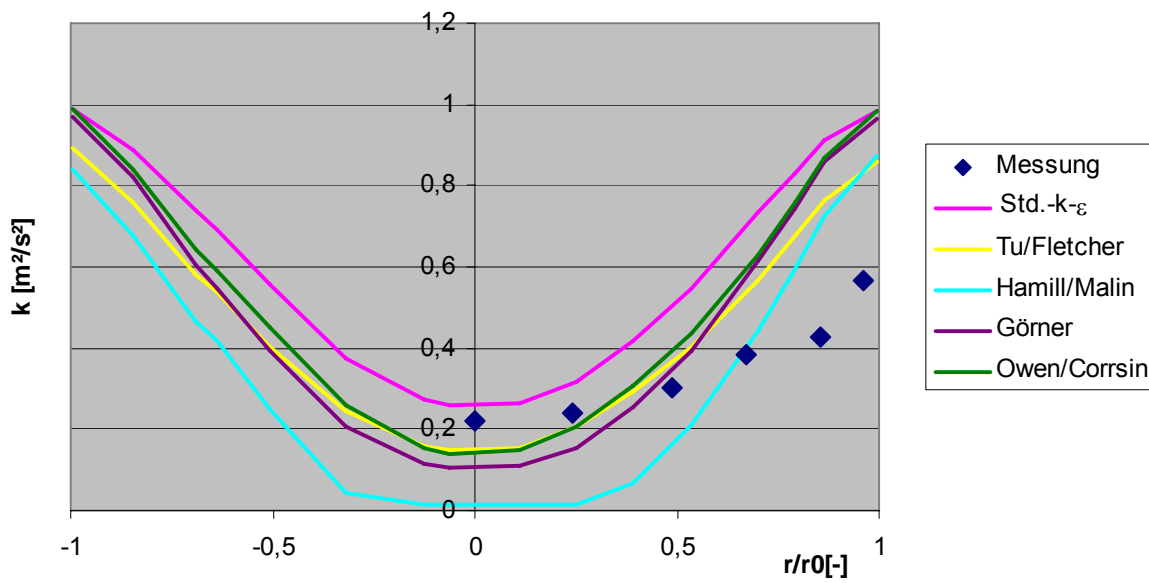


Abbildung 3-20: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 0,6 kg/kg [Savol98.01]

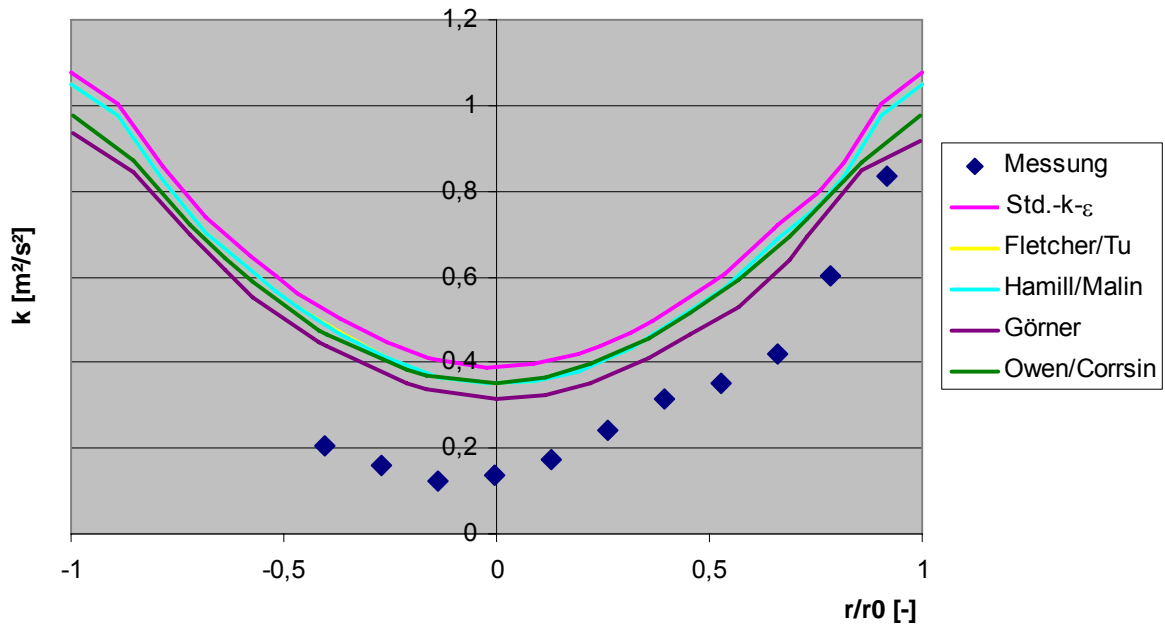


Abbildung 3-21: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 0,5 kg/kg [Tsuji86.01]

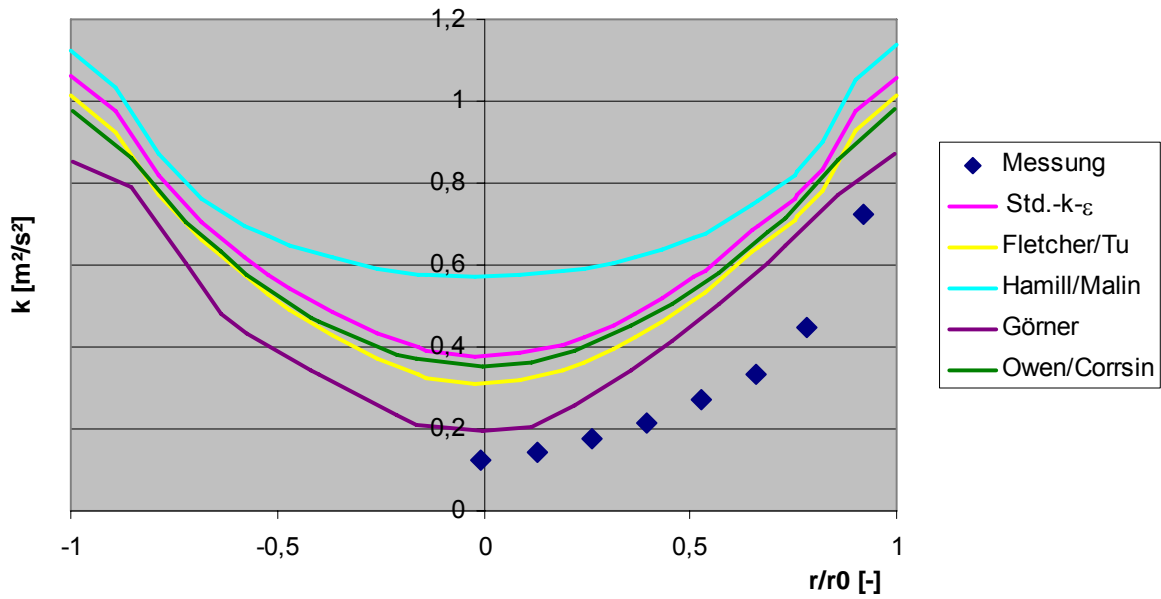


Abbildung 3-22: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 0,9 kg/kg [Tsuji86.01]

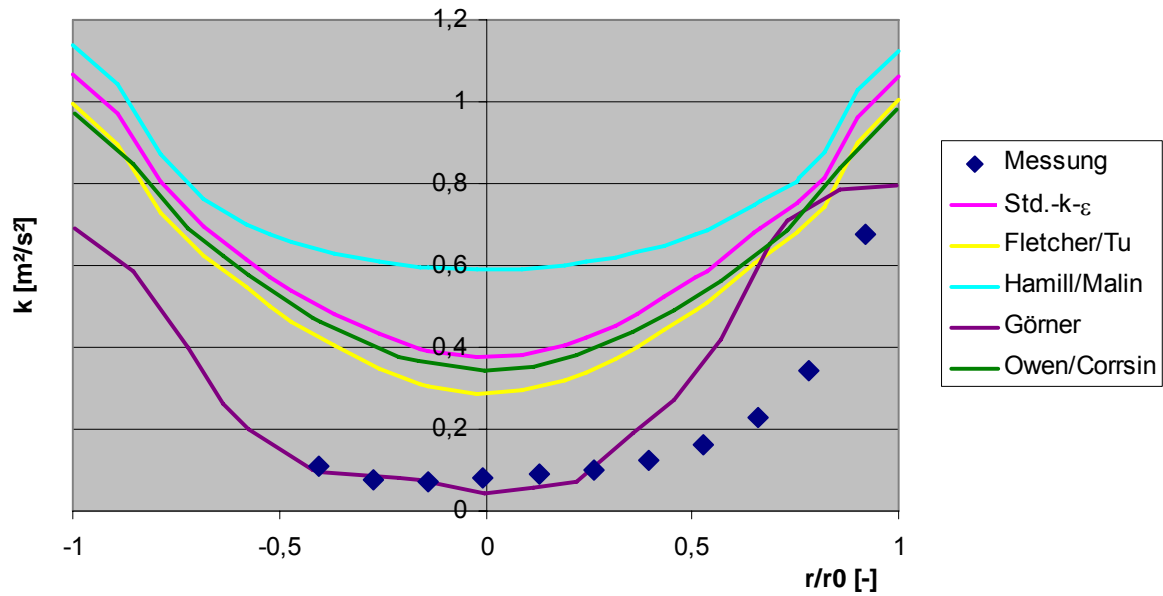


Abbildung 3-23: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 1,3 kg/kg [Tsuji86.01]

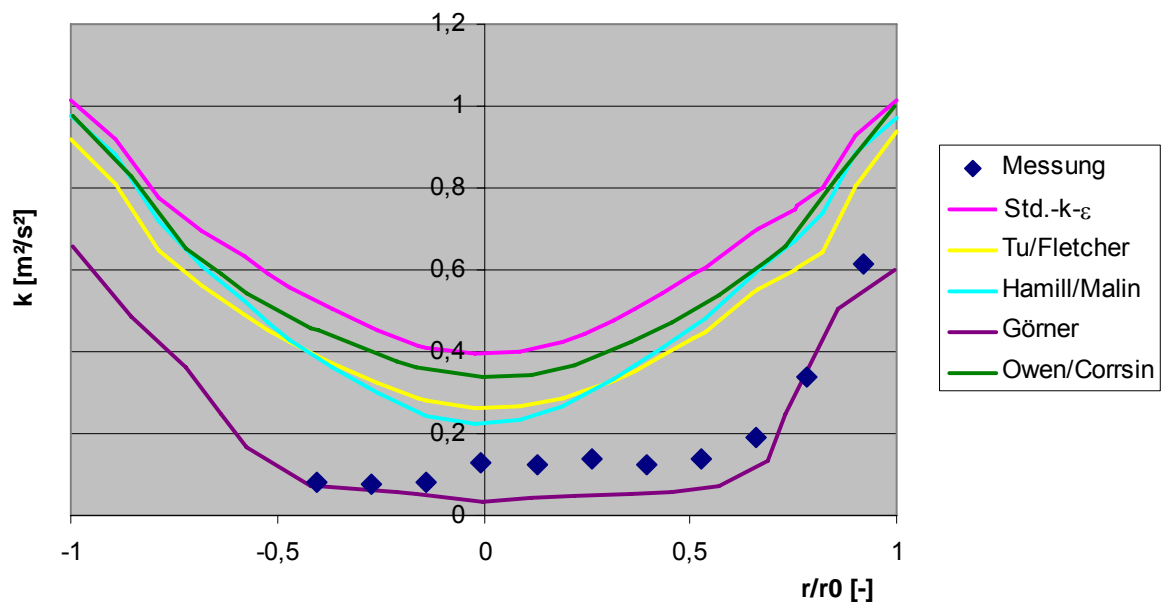


Abbildung 3-24: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 1,9 kg/kg [Tsuji86.01]

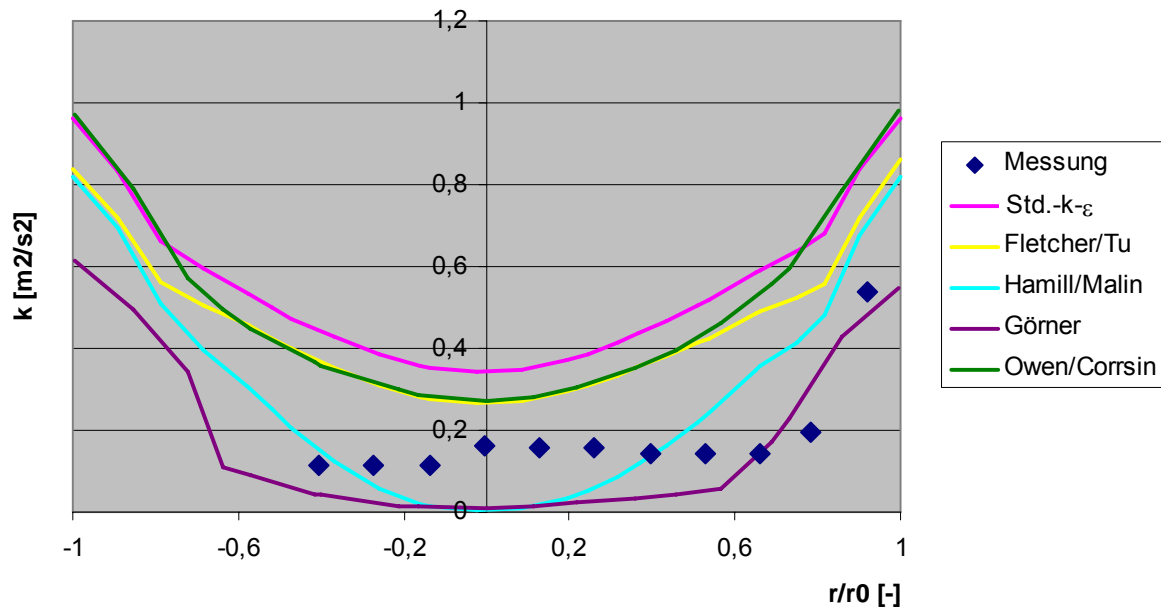


Abbildung 3-25: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 3,2 kg/kg [Tsuji86.01]

Bei den Versuchen mit Beladungen zwischen 0,2 und 0,5 kg/kg (Abbildung 3-17 bis Abbildung 3-19) weichen die Ergebnisse nach dem Standard-k- ϵ -Modell nur geringfügig von den Messungen ab. Bei der Beladung 0,6 kg/kg (Abbildung 3-20) wird die Diskrepanz deutlicher.

Bei den Messungen von Savolainen sowie Tsuji et al. für die jeweils gleiche Beladung von 0,5 kg/kg (Abbildung 3-19 bzw. Abbildung 3-21) fällt auf, dass die Abweichung bei Verwendung des Standard-k- ϵ -Modells bei Tsuji et al. bedeutend größer ist als bei Savolainen.

Bei den Experimenten von Tsuji (Abbildung 3-21 bis Abbildung 3-25) liefert das Standard-k- ϵ -Modell Werte, die im Strömungskern um 50 % bis 100 % über den Messungen liegen.

Das Quellterm-Modell von Tu und Fletcher stellt eine qualitative Verbesserung gegenüber dem Standard-k- ϵ -Modell dar. Bei den geringen Beladungen in den Experimenten von Tsuji (Abbildung 3-17 bis Abbildung 3-20) sagt es eine schwache Dämpfung gegenüber diesem voraus, die bei höheren Beladungen (Abbildung 3-22 bis Abbildung 3-25) systematisch stärker wird. Insgesamt wird eine deutlich zu schwache Dämpfung vorhergesagt; durch Anpassung der Modellkonstanten lassen sich hier eventuell Verbesserungen erzielen.

Das Quellterm-Modell von Hamill und Malin liefert keine befriedigenden Ergebnisse. Bei geringen Beladungen sagt es extrem starke Dämpfungen voraus, während es bei hohen z. T. ebenfalls extreme Dämpfungen, z. T. jedoch Turbulenzverstärkungen gegenüber dem Standard-k- ϵ -Modell vorhersagt. Neben den großen quantitativen Differenzen treten bei diesem Modell damit auch in ihrer Art unvorhersagbare qualitative Diskrepanzen auf.

Die Viskositätsmodelle nach Görner bzw. Owen und Corrsin liefern qualitativ vergleichbare Ergebnisse. Da sie sich letztlich nur durch Modellparameter unterscheiden, war dies zu erwarten. Sie sagen in allen Fällen eine Dämpfung der Turbulenz voraus. Bei den Beladungen von 0,9 kg/kg bis 1,9 kg/kg (Abbildung 3-22 bis Abbildung 3-24) ist das Görner-Modell bedeutend genauer. Darüber hinaus erfasst es die Vergleichmäßigung des Radialprofils bei Beladungen ab 1,3 kg/kg besser (Abbildung 3-23 bis Abbildung 3-25). Bei der höchsten Beladung von 3,2 kg/kg sagt es allerdings eine sehr starke Turbulenzdämpfung voraus.

In Abbildung 3-26 und Abbildung 3-27 sind die berechneten und gemessenen Profile der Axialgeschwindigkeit gegenübergestellt. Beim Modell nach Görner werden zu hohe Geschwindigkeiten im Strömungskern vorhergesagt. Dies könnte auf die Kopplung zwischen kinetischer Turbulenzenergie - die vom Görner-Modell zu niedrig vorhergesagt wird - und Impuls in der Transportgleichung der kinetischen Turbulenzenergie zurückzuführen sein. Die Ergebnisse der anderen Modelle entsprechen den Messungen recht gut.

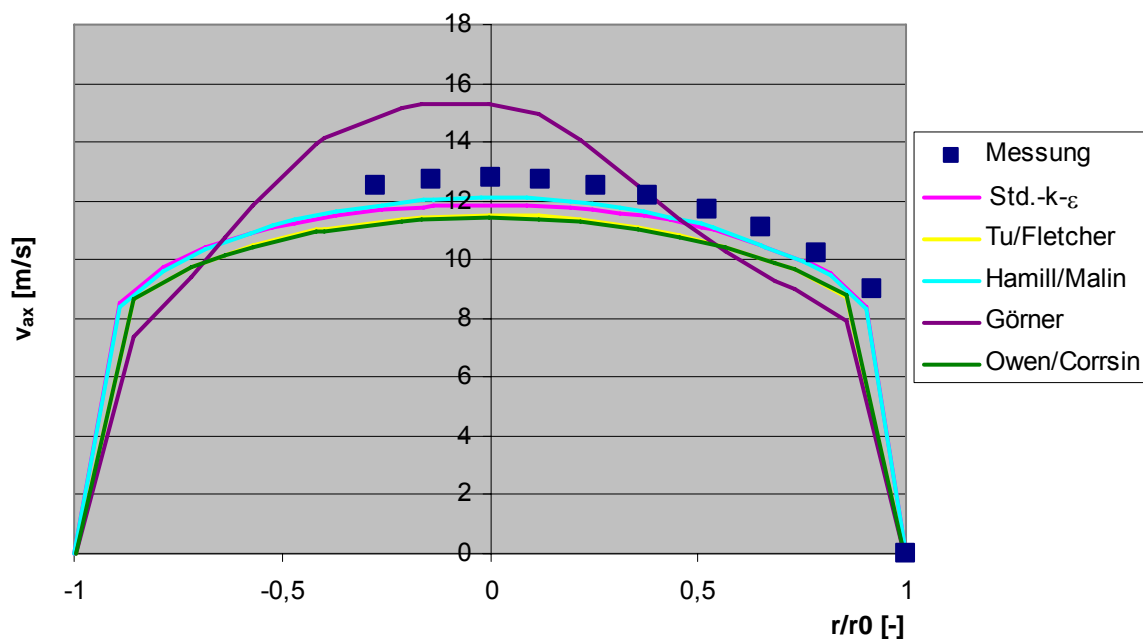


Abbildung 3-26: Berechnete und gemessene Profile der Axialgeschwindigkeit; Beladung 1,3 kg/kg [Tsuji86.01]

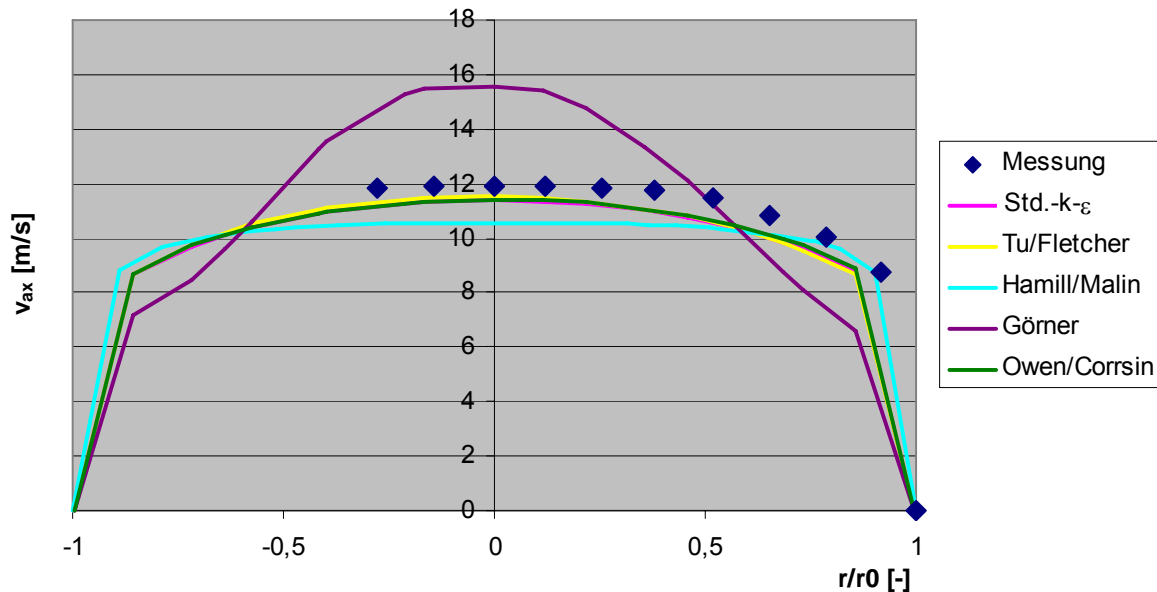


Abbildung 3-27: Berechnete und gemessene Profile der Axialgeschwindigkeit; Beladung 1,9 kg/kg [Tsuji86.01]

3.7 Adaption des Viskositätsmodells

Beim Viskositätsmodell lässt sich durch leichte Modifikationen eine wesentliche Verbesserung der Vorhersagegüte erzielen.

Von Portela et al. stammen zahlreiche Veröffentlichungen zur Wechselwirkung zwischen Fluid und Partikeln. Diese wurde mit DNS- und LES-Simulationen von Rohr- und Kanalströmungen untersucht. In [Porte02.01] erfolgten DNS- und LES-Simulationen einer mit kleinen Partikeln beladenen Kanalströmung. Dabei wurde festgestellt, dass die Partikel sowohl die Produktions- wie die Dissipationsrate der kinetischen Turbulenzenergie dämpfen, wobei in der Gesamtbilanz eine Dämpfung der Turbulenz erfolgt. Ebenfalls wurde die Abhängigkeit der Turbulenzmodulation vom Wandabstand untersucht und der Frage nachgegangen, wie die Turbulenzmodulation bei Verwendung des $k-\varepsilon$ -Modells modelliert werden kann.

Dabei stellten die Autoren fest:

- Die turbulente Viskosität ist bei beladener Strömung stets kleiner als bei unbeladener.
- Im Strömungskern, wo der Einfluss der Wand auf Strömung und Turbulenz vernachlässigbar ist, kann nach den Berechnungen bei Verwendung des $k-\varepsilon$ -Modells zur Beschreibung der Turbulenzmodulation mit hinreichender Genauigkeit ein Modell für die turbulente Viskosität verwendet werden. Die halbempirischen Viskositätsmodelle von Owen und Görner sind damit auch durch numerische Grundlagenuntersuchungen begründet (Abbildung 3-28).

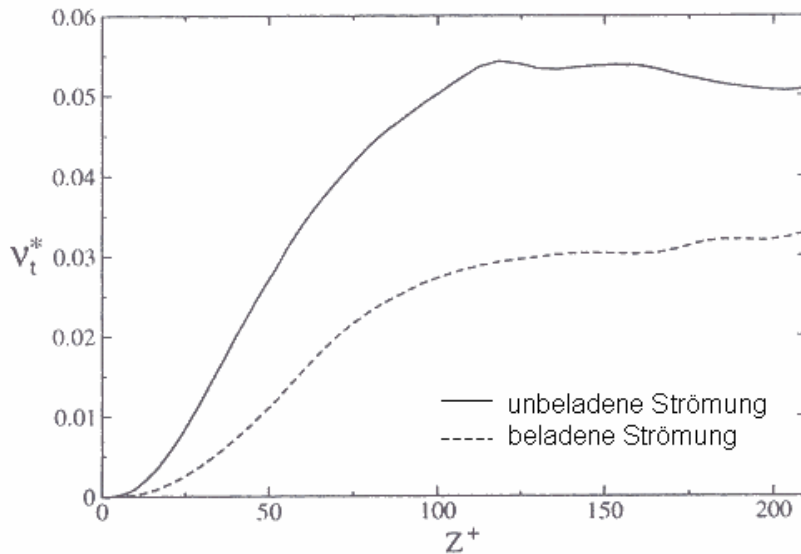


Abbildung 3-28: Normierte turbulente Viskosität v_t^* als Funktion des normierten Wandabstands Z^+ [Porte02.01].

Mathematisch betrachtet stellen die Viskositätsmodelle von Owen und Görner eine Erweiterung der Prandtl-Kolmogorov-Beziehung (Gleichung 3-31) dar. Die Erweiterung besteht in der Einführung einer beladungsabhängigen Korrekturfunktion $\overline{f_c}(m)$, die den Partikeleinfluss bei der Beladung m auf die turbulente Viskosität $\mu_t(m)$ beschreibt:

$$\mu_t(m) = \overline{f_c}(m) \cdot C_\mu \cdot \rho \cdot \frac{k^2}{\varepsilon} = \overline{f_c}(m) \cdot \mu_t(m=0) \quad \text{Gleichung 3-36}$$

mit

$\mu_t(m)$: turbulente Viskosität bei der Gasstrombeladung m [kg/(m s)]

$\overline{f_c}(m)$: Korrekturfunktion zur Beschreibung des Einflusses der Gasstrombeladung auf die turbulente Viskosität [-]

$\mu_t(m=0)$: turbulente Viskosität bei der Gasstrombeladung 0 [kg/(m s)]

m : Gasstrombeladung [kg/kg]

Für die Korrekturfunktion gilt dabei im turbulenten Freistrah nach Gleichung 3-35 (vgl. Abschnitt 0):

$$\overline{f_c}(m) = [1 + m]^{-1/2}. \quad \text{Gleichung 3-37}$$

mit

m : Gasstrombeladung [kg/kg]

Für die Anwendung auf turbulente partikelbeladene Rohrströmungen kann diese Funktion mit Hilfe von Messwerten aus turbulenten Rohrströmungen, wie den in Abschnitt 3.4.3 vorgestellten, ermittelt werden. Dieses Verfahren wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendet. Dabei wurde aufgrund der geringen Anzahl der zur Verfügung stehenden experimentellen Daten nicht versucht, die Korrekturfunktion möglichst exakt zu bestimmen, der Schwerpunkt lag vielmehr auf dem Nachweis der

grundsätzlichen Durchführbarkeit des Verfahrens und einer qualitativen Verbesserung der erzielbaren Vorhersagegüte.

Gleichung 3-37 leistet für Beladungen bis etwa 0,9 kg/kg gute Vorhersagen zum Geschwindigkeits- und Turbulenzprofil. Es liegt daher nahe, sie bis zu dieser Beladung beizubehalten und sie nur bei höheren Beladungen mittels Optimierungsrechnung erneut anzupassen. Das Ergebnis ist in Abbildung 3-29 dargestellt. Die Korrekturfunktion nähert sich nach den vorliegenden und diskutierten Messergebnissen offenbar einem Grenzwert von ca. 0,75 an:

$$\bar{f}_c(m) = \max\left([1 + m]^{-m/2}; 0,75\right) \quad \text{Gleichung 3-38}$$

mit
 m : Gasstrombelastung [kg/kg]

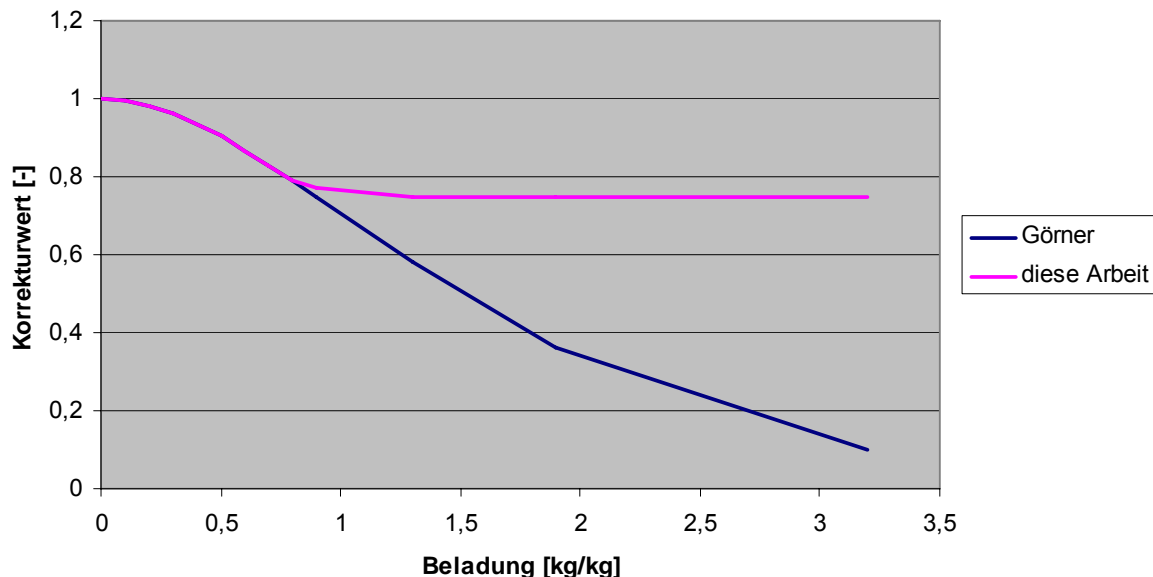


Abbildung 3-29: Verlauf der beladungsabhängigen Korrekturfunktion

Als Beladung kann in Gleichung 3-38 sowohl die lokale Beladung der jeweiligen Zelle als auch die globale Beladung der betrachteten Anlage eingesetzt werden. Der Einsatz der lokalen Beladung könnte die Genauigkeit der Rechnung erhöhen, da die lokale Turbulenzdämpfung in der einzelnen Zelle genauer beschrieben wird. Weil jedoch die Nichtlinearität der turbulenten Viskosität im zu lösenden Gleichungssystem wächst, wird dessen Konvergenzverhalten hierdurch verschlechtert.

Demgegenüber ist die Verwendung der globalen Beladung ungenauer, sie erhöht aber nicht die Nichtlinearität der turbulenten Viskosität, da der Korrekturfaktor eine globale Konstante ist. Daher verschlechtert das modifizierte Viskositätsmodell mit globaler Auflösung der Beladung das Konvergenzverhalten des zu lösenden Gleichungssystems gegenüber dem Standard-k-ε-Modell nicht.

Bei den in diesem Kapitel vorgestellten Rechnungen wurde stets die lokale Beladung verwendet. Da die Dispersion der Partikel in den Rohren der simulierten Versuchsanlagen verhältnismäßig gleichmäßig ist, ergeben sich bei Benutzung der globalen Beladung nur geringfügige Abweichungen. Vergleichsrechnungen, bei

denen statt der lokalen die globale Gasphasenbeladung verwendet wurde, zeigten keine nennenswerten Abweichungen beim Turbulenz- und Strömungsprofil. Als Ergebnis lässt sich daher festhalten, dass es bei der Simulation von Rohrströmungen genügt, die globale Beladung zu verwenden.

Berechnungen der kinetischen Turbulenzenergie mithilfe der so modellierten beladungsabhängigen turbulenten Viskosität zeigen eine gute qualitative Übereinstimmung mit Messwerten (Abbildung 3-30 bis Abbildung 3-33). Das Profil der Axialgeschwindigkeit wird ebenfalls realistisch vorhergesagt (Abbildung 3-34 und Abbildung 3-35). Die Beschränkung der Korrekturfunktion bei höheren Beladungen hat den zusätzlichen Vorteil, dass bei der CFD-Simulation des Gesamtprozesses auch in den Bereichen, in denen eine sehr hohe Beladung herrscht (z. B. Mehleinträge, Brennerbereich, Wandbereich der Mischkammer) die turbulente Viskosität keine extrem niedrigen Werte annehmen kann. Dies bewirkt, dass

- die berechnete kinetische Turbulenzenergie an solchen Stellen keine unrealistisch niedrige Werte annimmt,
- die erforderliche Robustheit des Turbulenzmodells erhöht wird.

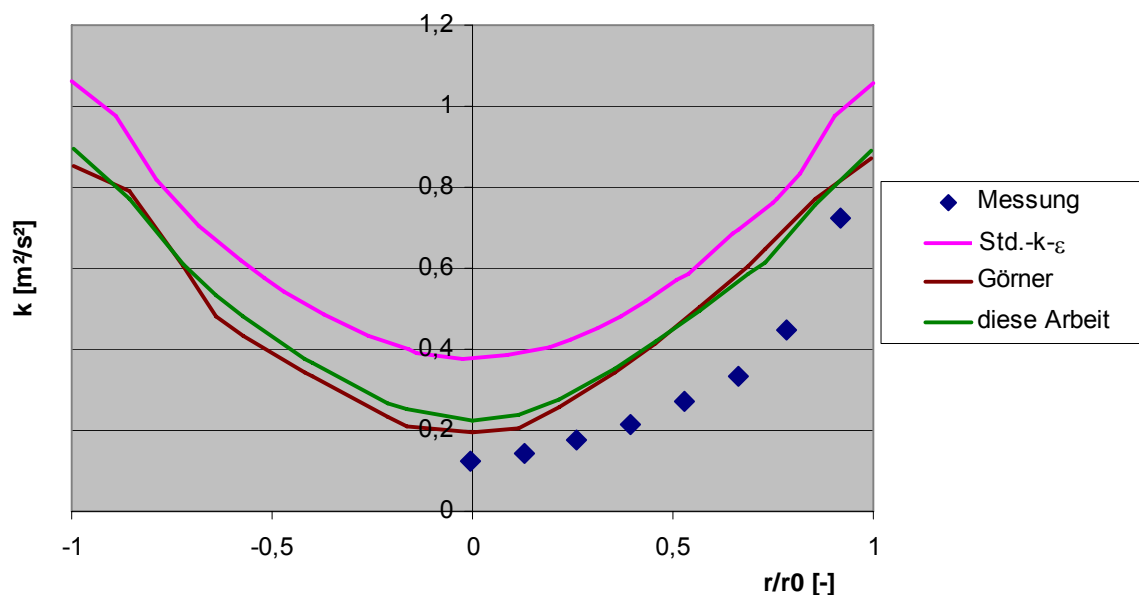


Abbildung 3-30: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 0,9 kg/kg [Tsuji86.01]

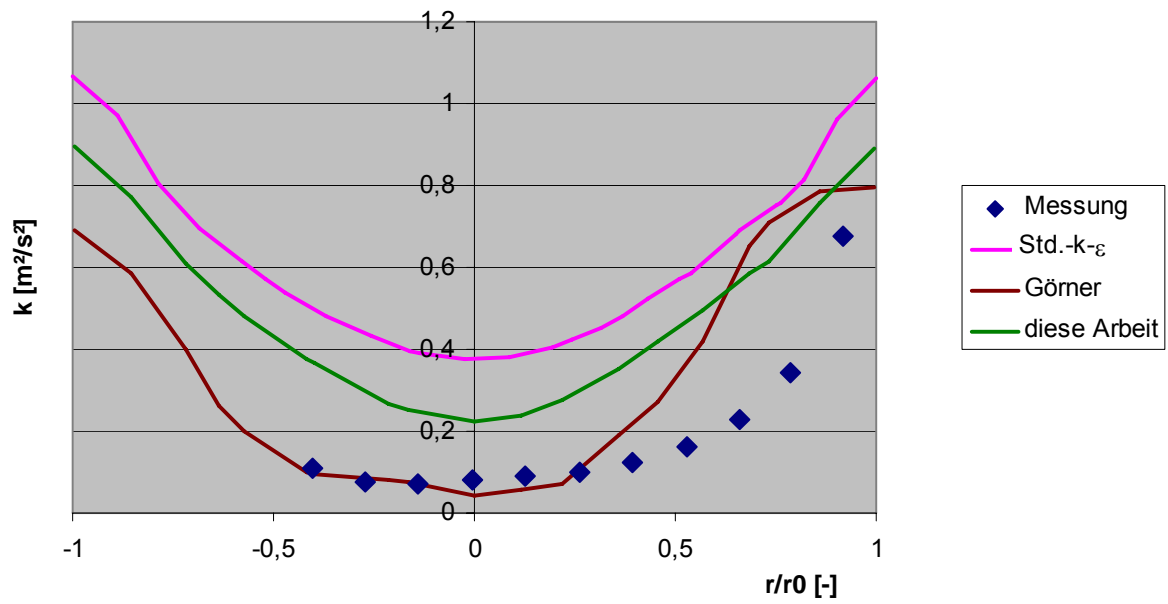


Abbildung 3-31: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 1,3 kg/kg [Tsuji86.01]

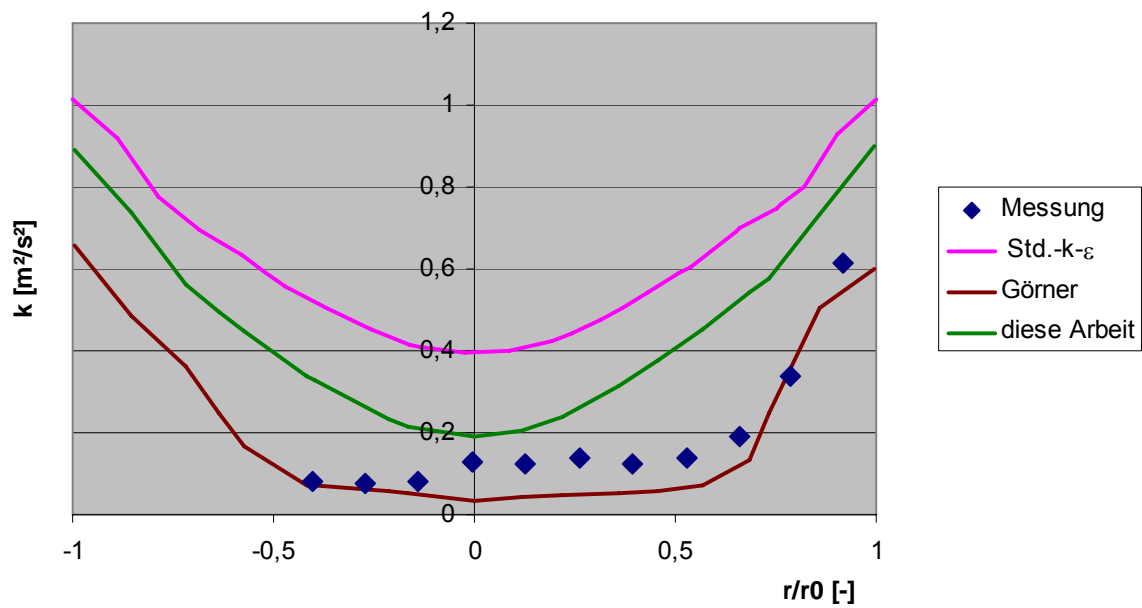


Abbildung 3-32: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 1,9 kg/kg [Tsuji86.01]

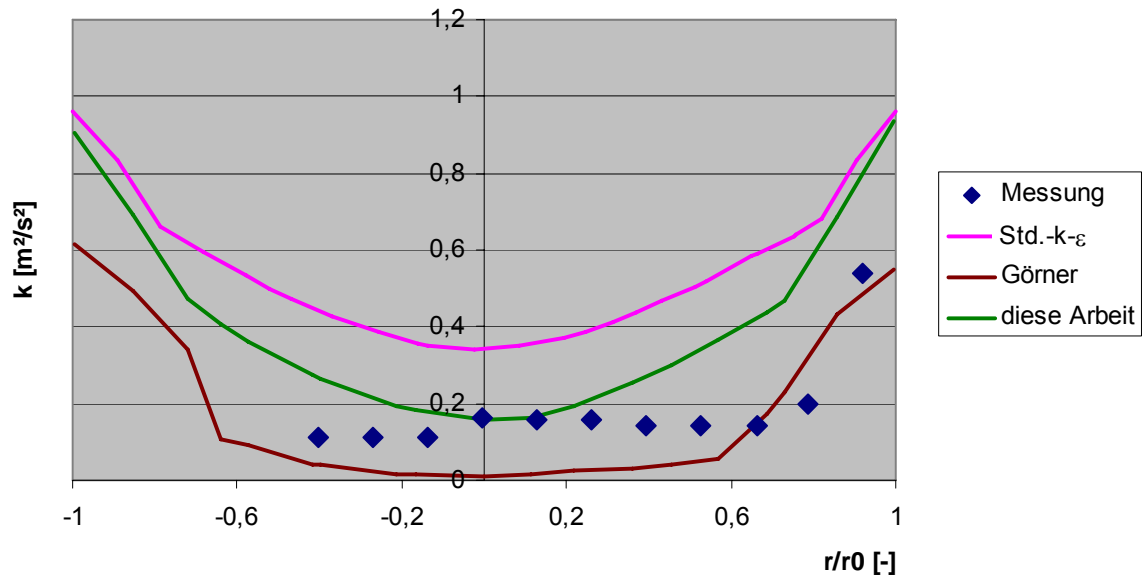


Abbildung 3-33: Berechnete und gemessene Profile der kinetischen Turbulenzenergie; Beladung 3,2 kg/kg [Tsujii86.01]

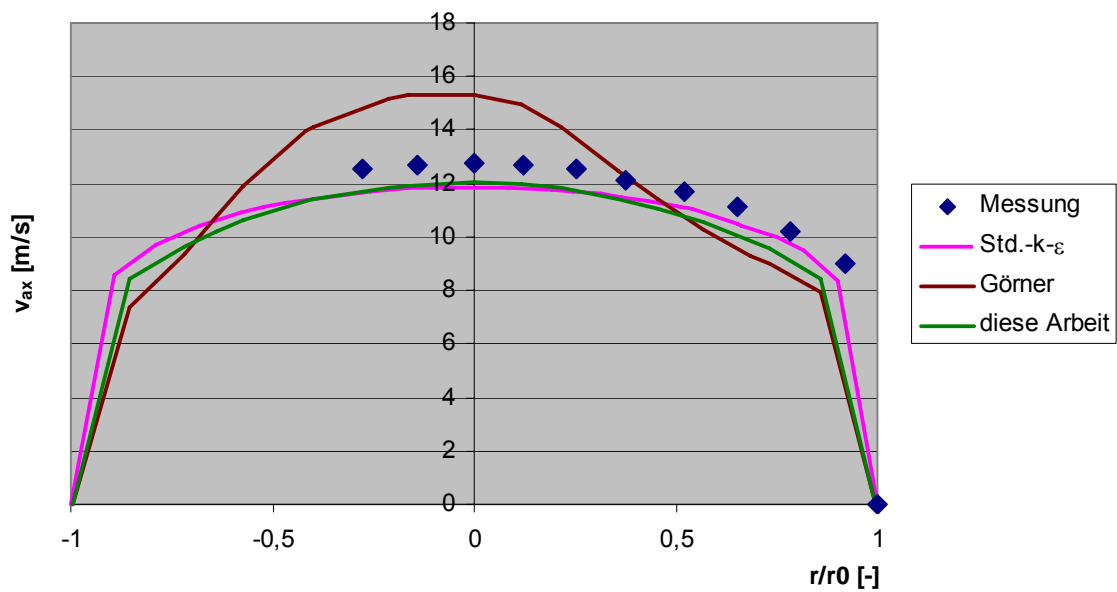


Abbildung 3-34: Berechnete und gemessene Profile der Axialgeschwindigkeit; Beladung 1,3 kg/kg [Tsujii86.01]

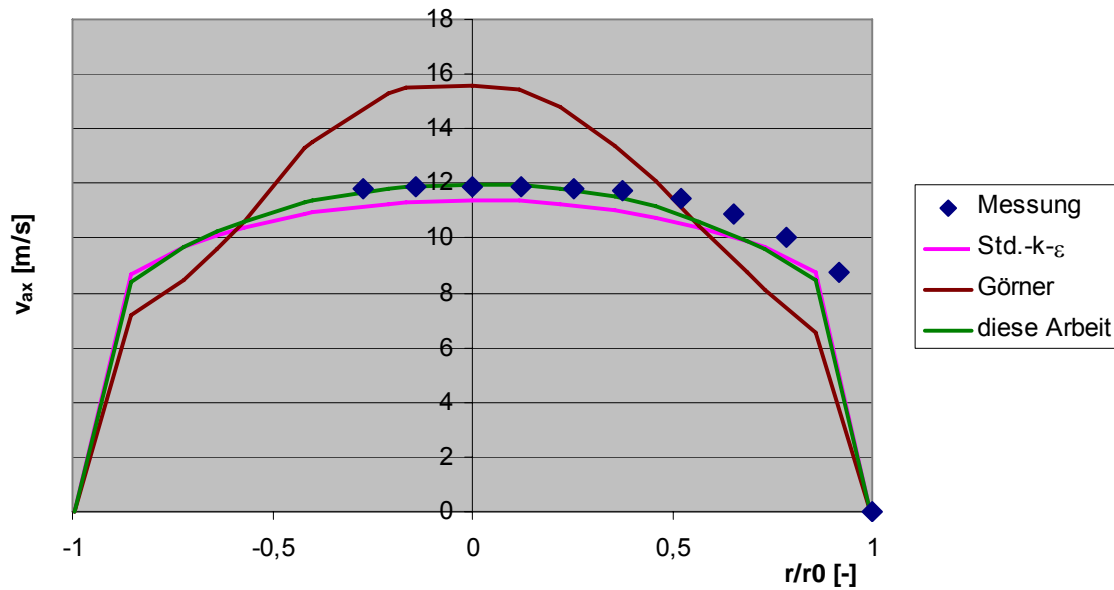


Abbildung 3-35: Berechnete und gemessene Profile der Axialgeschwindigkeit; Beladung 1,9 kg/kg [Tsuji86.01]

In Abbildung 3-36 ist das Profil der Gasphasenbeladung dargestellt. Der stochastische Einfluss des Discrete-Random-Walk-Modells (Abschnitt 2.3.2), mit dem die Partikelbahnen berechnet werden, ist an der ungleichmäßigen Partikeldispersion gut erkennbar. Ein systematischer Einfluss des Turbulenzmodells auf die Partikeldispersion ließ sich im Rahmen der Rechnungen nicht nachweisen.

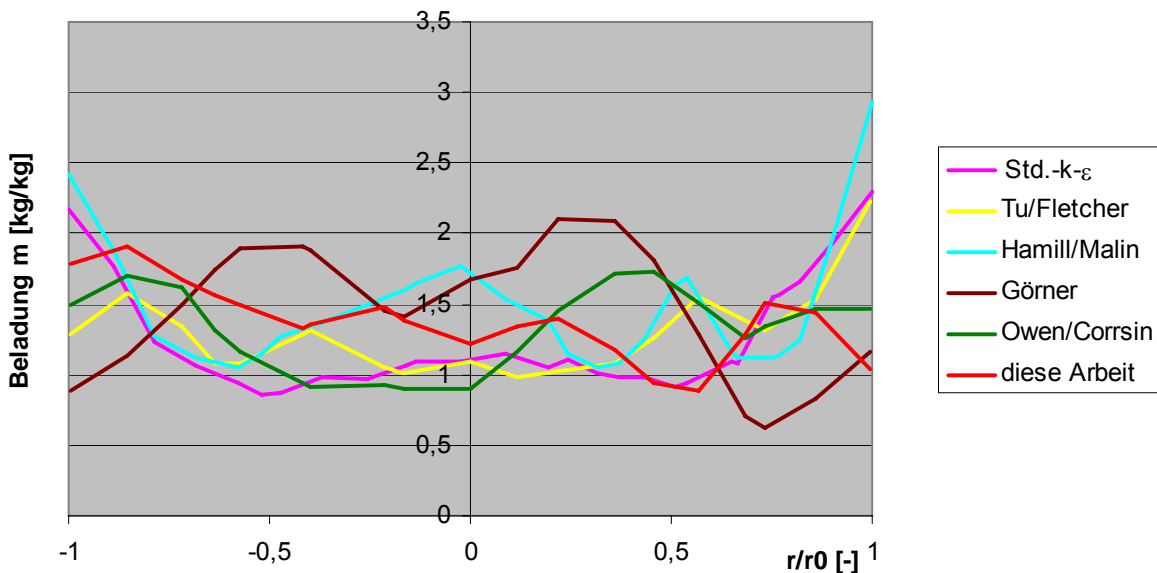


Abbildung 3-36: Einfluss des Turbulenzmodells auf die Partikeldispersion; Beladung 1,3 kg/kg [Tsuji86.01]

3.8 Untersuchung des Wandeinflusses

Bei der Bewertung der Turbulenzmodelle anhand der Laborexperimente in Abschnitt 3.6 und Abschnitt 3.7 wurde hauptsächlich auf ihre Vorhersagegüte im Strömungskern geachtet. Die zum Teil erheblichen Abweichungen im Wandbereich wurden dagegen nicht betrachtet. Maßgeblich für die Qualität der untersuchten Modelle ist bei der Simulation des Calcinators, wie gut sie die Turbulenzverhältnisse in größerer Entfernung von der Wand beschreiben, während die genaue Beschreibung des wandnahen Bereichs nicht erforderlich ist.

Bei Laboranlagen mit Rohrdurchmessern im unteren Zentimeter-Bereich ist der Einfluss der Wand auf die Turbulenz größer als beim Vorcalcinator, dessen Querschnittsabmessungen im Bereich mehrerer Meter liegen. In diesem Abschnitt wird nachgewiesen, dass selbst bei kleinen Rohrdurchmessern, wie sie bei Versuchsanlagen vorherrschen, die Kernturbulenz von der Wand unabhängig ist. Daher ist es zulässig, den Wandbereich bei der Bewertung der Modelle außer Betracht zu lassen.

Das k - ε -Modell geht im wandnahen Bereich der Strömung davon aus, dass Produktionsrate und Dissipationsrate der kinetischen Energie an der Wand gleich groß sind [Fluen06.01]. Bei Zweiphasen-Strömungen ist diese Annahme nicht länger zulässig, die Verhältnisse zwischen Produktions- und Dissipationsrate werden dort sehr komplex [Porte02.01].

Bei den im vorangegangenen Abschnitt vorgestellten Simulationen von Zweiphasenströmungen erfolgte die Wandbehandlung trotzdem mit den vereinfachenden Annahmen der Einphasenströmung, hierdurch konnte die Simulation beträchtlich vereinfacht werden. Die Turbulenz im wandnahen Bereich wurde daher nicht richtig beschrieben, entsprechend groß sind bei höheren Beladungen die Abweichungen zwischen gemessener und berechneter Turbulenzenergie in Wandnähe (Abbildung 3-25).

Die Transportgleichung für k (Gleichung 2-11) wird vom verwendeten CFD-Code FLUENT im gesamten Rechengebiet einschließlich der an die Wand angrenzenden Zellen gelöst. An der Wand gilt als Randbedingung für k [Fluen06.01]

$$\frac{\partial k}{\partial n} = 0.$$

Gleichung 3-39

mit

k : kinetische Turbulenzenergie [m^2/s^2]
 n : Raumrichtung senkrecht zur Wand [m]

Die Transportgleichung für ε wird in den Wandzellen nicht gelöst, statt dessen wird ε dort nach folgender Beziehung berechnet [Fluen06.01]:

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{\kappa y_P}$$

Gleichung 3-40

mit

- ε : Dissipationsrate [m^2/s^3]
- C_μ : Modellkonstante des k- ε -Modells (0,09)
- k : kinetische Turbulenzenergie [m^2/s^2]
- κ : von-Kármán-Konstante (0,4187)
- y_P : Abstand des Zellmittelpunkts von der Wand [m]

So ist ε an der Wand direkt mit k gekoppelt. Die einzig praktikable Möglichkeit, in die Turbulenzbeschreibung an der Wand einzugreifen, besteht darin, in den an die Wand angrenzenden Zellen einen zusätzlichen Quellterm in der Transportgleichung für k , Gleichung 2-11, einzuführen. Hiermit wird die Turbulenzmodulation in den Wandzellen beschrieben. Dieser Quellterm wurde für einige der im vorangegangenen Abschnitt vorgestellten Experimente bestimmt und erneute CFD-Simulationen der Experimente von Tsuji et al. und Savolainen durchgeführt, wobei der zusätzliche Quellterm für k im Wandbereich berücksichtigt wurde.

Abbildung 3-37 zeigt beispielhaft einige so erhaltene Rechnungsergebnisse. An der Rohrwand stimmt die berechnete kinetische Turbulenzenergie jetzt sehr gut mit den Messungen überein, während die Kernturbulenz unverändert geblieben ist. Die Vernachlässigung der Turbulenzmodulation im Wandbereich ist daher eine zulässige Vereinfachung.

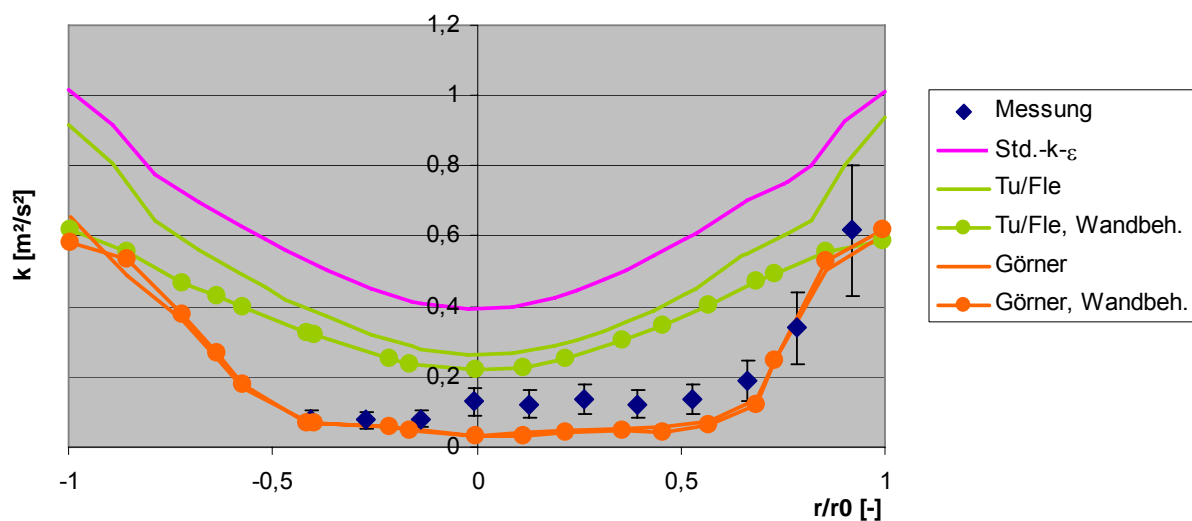


Abbildung 3-37: Einfluss der Wandbehandlung auf die Kernturbulenz; Beladung 1,9 kg/kg

3.9 Exemplarische Rechnungen für eine spezielle Calcinatorgeometrie

Zur weiteren Untersuchung der Modulationsmodelle wurden Rechnungen für eine vereinfachte Calcinatorgeometrie durchgeführt. Hierfür wurde ein Rohr (\varnothing 3 m, Länge 15 m) gewählt. Abbildung 3-38 zeigt Profile der Axialgeschwindigkeit bei einem Partikeldurchmesser von 10 μm und einer Beladung von 1,3 kg/kg. Bei den Viskositätsansätzen nach Görner bzw. Owen und Corssin ist das Profil im Wandbereich deutlich überhöht und fällt zur Rohrachse hin ab, beim Quelltermmodell

von Tu und Fletcher, dem Standard-k-ε-Modell sowie dem im Rahmen der vorliegenden Arbeit weiterentwickelten Viskositätsansatz ist diese Tendenz nicht oder kaum vorhanden.

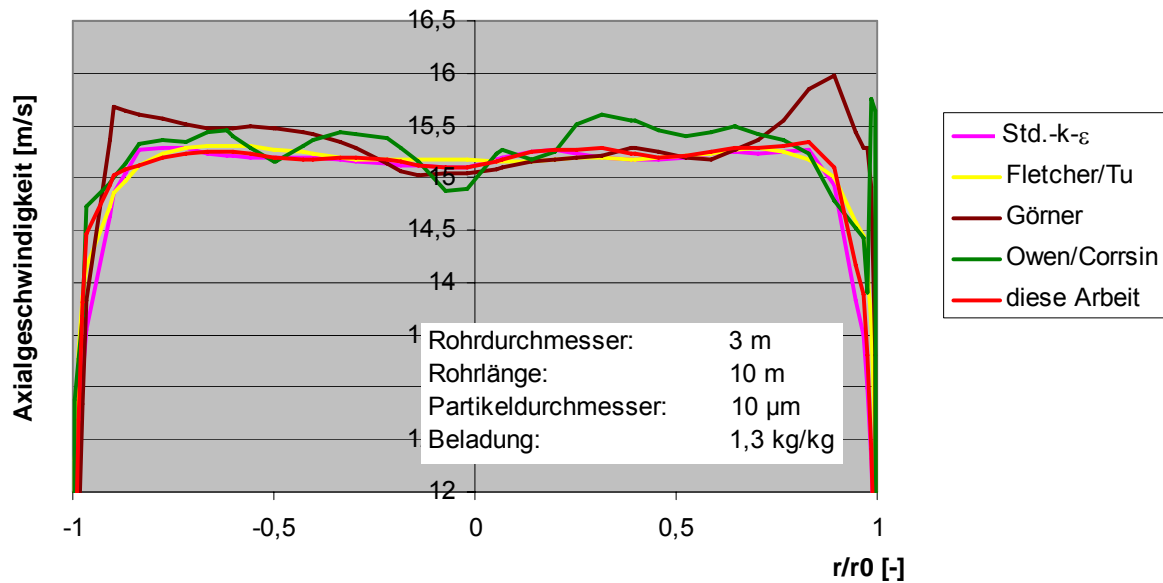


Abbildung 3-38: Profil der Axialgeschwindigkeit an einer vereinfachten Calcinatorgeometrie

Ein berechnetes Profil der kinetischen Turbulenzenergie ist in Abbildung 3-39 dargestellt. Das Profil der Dissipationsrate zeigt Abbildung 3-40. Die Dissipationsrate ist zur Verdeutlichung des Sachverhalts in Abbildung 3-41 in normierter Form dargestellt, wobei die Normierung mit der Dissipationsrate nach dem Standard-k-ε-Modell erfolgte. Beim modifizierten Ansatz nach Görner beträgt die Dissipationsrate ca. 80 % des Wertes nach dem Standard-k-ε-Modell, bei den Ansätzen nach Tu und Fletcher bzw. Görner 50 %, während das Viskositätsmodell nach Owen eine Abnahme auf ca. 8 % des Wertes des Standard-k-ε-Modells vorhersagt.

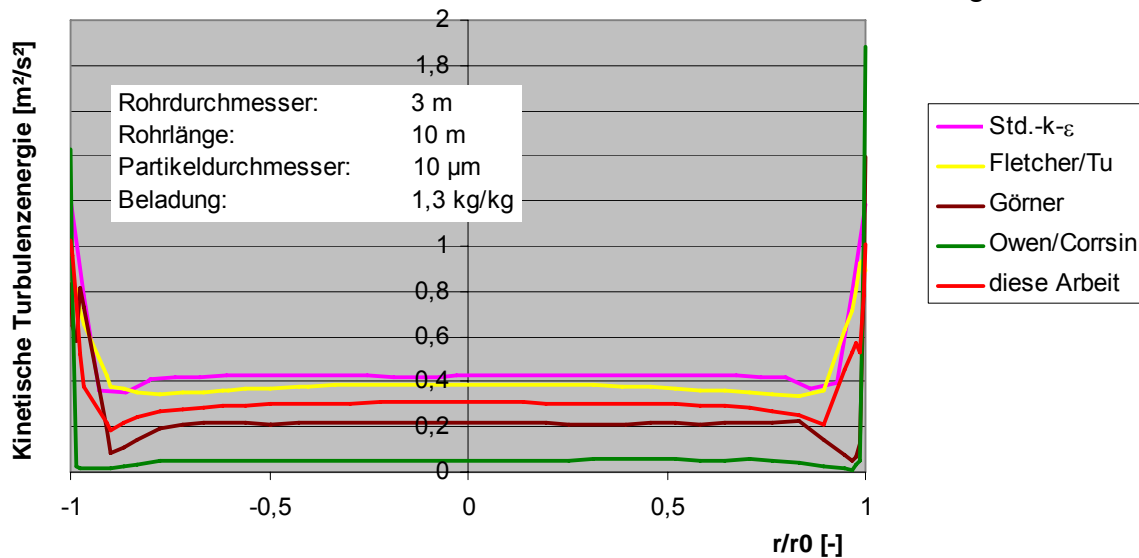


Abbildung 3-39: Profil der kinetischen Turbulenzenergie an einer vereinfachten Calcinatorgeometrie

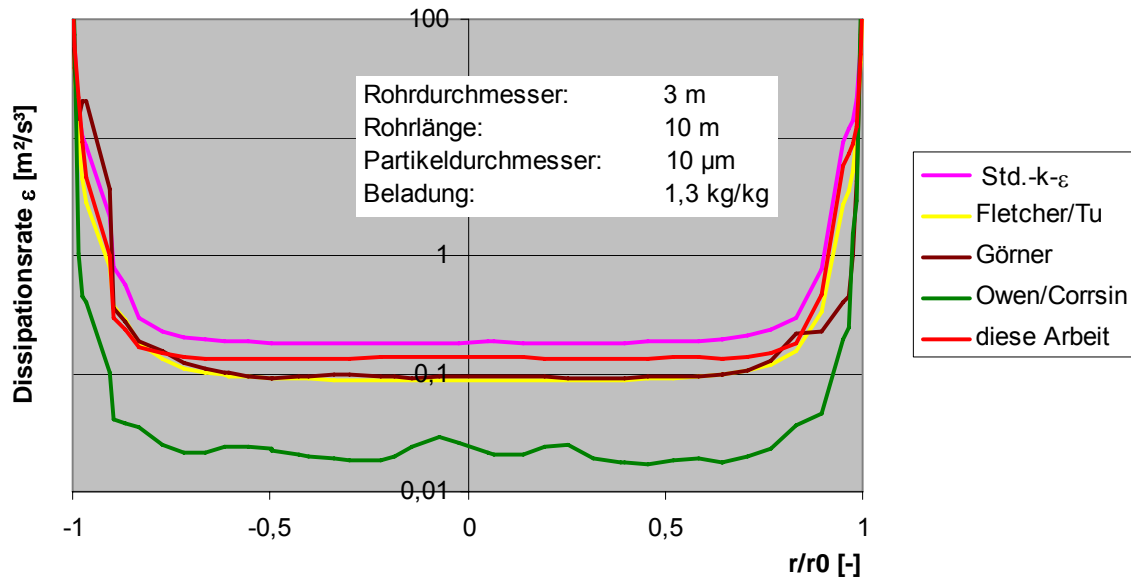


Abbildung 3-40: Profil der Dissipationsrate an einer vereinfachten Calcinatorgeometrie

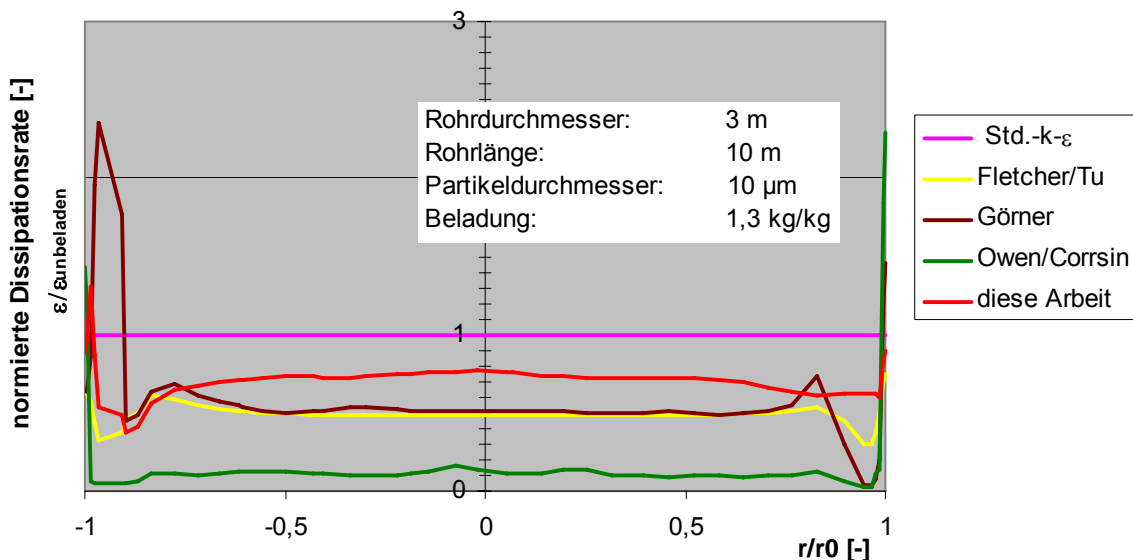


Abbildung 3-41: Profil der normierten Dissipationsrate an einer vereinfachten Calcinatorgeometrie

3.10 Schlussfolgerungen

Die durchgeführten Rechnungen sowie Vergleiche mit Messungen zeigen, dass es grundsätzlich möglich ist, die Turbulenzmodulation durch Partikel mit einem modifizierten k- ϵ -Modell zu beschreiben. Sowohl das Quelltermmodell von Tu und Fletcher als auch der im Rahmen der vorliegenden Arbeit weiterentwickelte Viskositätsansatz liefern tendenziell gute Vorhersagen. Das Viskositätsmodell von Owen und besonders das Quelltermmodell nach Mostafa und Mongia zeigen dagegen keine zufrieden stellenden Ergebnisse.

Bei weiteren Vergleichsrechnungen an den einfachen Rohrgeometrien zeigte das Modell von Tu und Fletcher ein vielfach sehr schlechtes Konvergenzverhalten, das Berechnungen z. T. unmöglich machte. Daher erscheint der weiterentwickelte Viskositätsansatz am besten für eine Calcinatorsimulation geeignet. Darüber hinaus

verlangt er einen geringeren Rechenaufwand als ein Quelltermansatz und ist durch Parameteranpassung in seinen qualitativen Vorhersagen gut optimierbar. Durch die beschriebene Beschränkung des Korrekturfaktors werden Konvergenzprobleme auch bei sehr hohen örtlichen Beladungen vermieden.

Die Auswertung der in diesem Kapitel vorgestellten CFD-Simulationen brachte folgende Erkenntnisse:

- Die Kernturbulenz ist bereits bei den dünnen Röhren der Versuchsanlagen (\emptyset im cm-Bereich) unabhängig von der Wandturbulenz. Es ist daher für eine Calcinatorsimulation nicht erforderlich, die Turbulenzmodulation im Wandbereich zu berücksichtigen.
- Beim Viskositätsansatz genügt es bei gleichmäßiger Partikeldispersion, die globale Beladung der Gasphase bei der Beschreibung der Turbulenzmodulation zu verwenden. Die aufwändigere Berücksichtigung der lokalen Beladung ist nicht erforderlich.

Unbefriedigend ist, dass keine Messwerte von polydispersen Strömungen zur Verfügung stehen, die sich unter Umständen anders verhalten können als monodisperse [Yarin94.01] (vgl. Abschnitt 3.2). Ein Vergleich solcher Messwerte mit entsprechenden Simulationsergebnissen würde der quantitativen Validierung von Modulationsmodellen neue Impulse geben.

4 CFD-Simulation des Vorcalcinierprozesses

4.1 Identifikation und Beschreibung der Einzelmechanismen

Als wesentliche Einzelprozesse sind bei der CFD-Simulation des Zementherstellungsprozesses zu berücksichtigen:

- Kohleverbrennung: Trocknung, Pyrolyse, Koksabbrand (Abschnitt 4.1.1)
- Chemische Reaktionen in der Gasphase: Flüchtigenabbrand, CO-Ausbrand, NO_x-Bildung (Abschnitt 4.1.2)
- Calcinierung, Sulfatierung und Versinterung der Kalkmehlpartikel (Abschnitt 4.1.3)
- Turbulenzmodulation in der Gasphase durch die Kalkmehlpartikel (Abschnitt 4.1.4)
- Beeinflussung des Strahlungswärmeaustauschs durch die Partikel (Abschnitt 4.1.5).

Diese einzelnen Vorgänge sind untereinander stark gekoppelt. Die räumliche und zeitliche Nähe von Kohleverbrennung und Calcinierung des Kalkmehls bewirkt, dass die durch die Verbrennung freigesetzte Energie umgehend von der exothermen Calcinierungsreaktion aufgebraucht wird. Durch die hohe Beladung der Gasphase mit Feststoff (global ca. 1,5 kg Feststoff/kg Gas, lokal noch weitaus höher) dämpfen die Kohle- und Kalkmehlpartikel die Turbulenz der Gasphase und beeinflussen damit die Durchmischung der Gasphasenspezies, insbesondere die Durchmischung von Kohleflüchtigen, CO und Luft. Dies wirkt sich unmittelbar auf die Gasphasenchemie (Flüchtigenabbrand, NO_x-Bildung, CO-Ausbrand) aus. Die Beeinflussung der Strahlungsverhältnisse kann sich auf die Temperaturverteilung im Calcinator auswirken, die wiederum chemische Reaktionen, insbesondere die NO_x-Bildung, beeinflusst.

4.1.1 Kohleverbrennung

Für die Beschreibung der Kohleverbrennung existieren zahlreiche etablierte Modelle. Eine Übersicht geben [Görne91.01, Fluen07.01]. Diese Modelle stehen in dem im Rahmen dieser Arbeit verwendeten CFD-Code FLUENT® bereits zur Verfügung, so dass für die Beschreibung der Kohleverbrennung lediglich die für die verwendete Kohlesorte am besten geeigneten Submodelle (für Pyrolyse, Koksabbrand usw.) auszuwählen und entsprechende Stoffwerte (z. B. Flüchtigen- und Aschegehalt, C-Anteil) vorzugeben waren. Diese wurden aus den vorhandenen Daten der Kohleanalyse berechnet.

Bei sehr geringen Temperaturen und nach dem Koksabbrand wird das Brennstoffpartikel als chemisch inert betrachtet, d. h. es findet kein Stoffaustausch mit der Umgebung statt, jedoch ein Wärmeaustausch durch Strahlung und Konvektion. Nach der anfänglichen Erwärmung beginnt die Trocknungsphase, auf die sich die Pyrolysephase gefolgt vom Koksabbrand anschließt. Nach dem Koksabbrand wird das verbleibende Aschepartikel wieder als chemisch inert betrachtet.

Das FLUENT-Pyrolysemodell definiert die generische chemische Spezies lig_vol ("lignite volatiles", Kohleflüchtige), die im Verlauf der Pyrolyse von der Kohlephase in die Gasphase übergeht und dort an der Verbrennung teilnimmt. Die Definition der chemischen Reaktionen erfolgt durch den Nutzer. Hierauf wird in Abschnitt. 4.1.2 eingegangen.

Der Koksabbrand wird durch die Reaktion

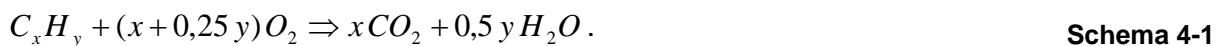


beschrieben, wobei O_2 aus der Gasphase verbraucht wird und gleichzeitig CO in die Gasphase übergeht. Für die Beschreibung der Kinetik dieser Reaktion existieren verschiedene Ansätze, eine Übersicht geben [Fluen07.01, Görne91.01].

4.1.2 Chemische Reaktionen in der Gasphase

Für die Beschreibung der Kinetik der chemischen Reaktionen in der Gasphase können Arrhenius-Ansätze (Abschnitt 2.5.2.1), das Eddy-Dissipation-Modell (Abschnitt 2.5.2.2), oder das Eddy-Dissipation-Concept (Abschnitt 2.5.2.3) verwendet werden.

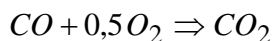
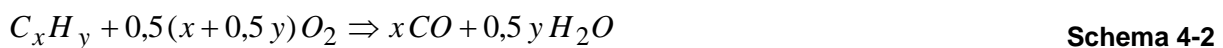
Zusätzlich ist ein geeignetes Reaktionsschema zu wählen. Ein Einschritt-Schema unterstellt den direkten Abbrand der Kohleflüchtigen zu CO_2 und Wasser nach der Bruttogleichung



**Einschritt-Reaktionsschema zur
Beschreibung des Brennstoffbrands**

Naturgemäß kann es keine Informationen über real auftretende Zwischenprodukte wie CO liefern. Vorteil eines solchen Ansatzes ist, dass weniger Spezies als bei komplexeren Schemen betrachtet werden und daher für weniger Spezies Transportgleichungen zu lösen sind.

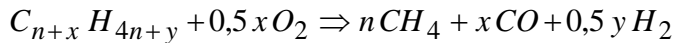
Soll die CO-Bildung ebenfalls erfasst werden, so ist mindestens ein Zweischritt-Schema erforderlich:



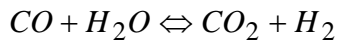
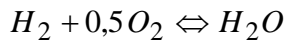
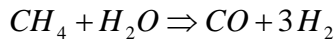
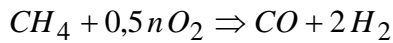
**Zweischritt-Reaktionsschema zur
Beschreibung des Brennstoffabbrands**

Bei einem Teil der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Rechnungen wurde das Zweischritt-Schema (Schema 4-2) zusammen mit dem Eddy-Dissipation-Modell (Abschnitt 2.5.2.2) verwendet. Diese Kombination stellt im Hinblick auf die erforderliche Rechenzeit eine Minimallösung dar, die eine noch akzeptable Vorhersagegenauigkeit erwarten lässt. Da die "mixed = brennt"-Annahme bei der langsamen Kinetik des CO-Ausbrands nicht realistisch ist, lagen so berechnete CO-Konzentrationen um ca. 50 bis 70 % unter den Messwerten. Im weiteren Verlauf der Arbeit wurde das Vierschritt-Schema von Jones und Lindstedt (vgl. Abschnitt 2.5.1.1) verwendet. Da das Vierschritt-Schema als Ausgangsprodukt der Verbrennung Alkane

(z. B. CH₄) betrachtet, wurde als weitere Reaktion der primäre Abbrand der Kohleflüchtigen eingeführt (Schema 4-3).



Schema 4-3



Vollständiges Vierschritt-Reaktionsschema zur Beschreibung des Brennstoff-abbrands

Zur Beschreibung der Reaktionskinetik des Vierschritt-Mechanismus wurde ursprünglich das Eddy-Dissipation-Concept (Abschnitt 2.5.2.3) mit den von Jones und Lindstedt [Jones88.01] angegebenen kinetischen Parametern verwendet. Dieses bietet sich an, da es die im Calcinator auftretenden Wechselwirkungen zwischen Turbulenz und chemischer Reaktion am besten erfasst und sowohl kinetisch kontrollierte als auch Mischungskontrollierte Reaktionen beschreiben kann. Im Calcinator sind die Reaktanden nicht unbedingt hinreichend vorgemischt, so dass sowohl die erforderliche Durchmischung der Edukte durch die Turbulenz den chemischen Umsatz begrenzen kann, als auch die Kinetik einer entsprechend langsamen Reaktion. Ein Beispiel hierfür ist ein zweisträngiger Calcinator, bei dem die CO-reiche und O₂-freie Strähne aus dem Ofenstrang und die O₂-haltige Strähne des Tertiärluftstrangs zusammengeführt werden (vgl. Abschnitt 1.2, Abbildung 1-3). Dieser Anlagenteil wurde vom Erbauer bewusst so gestaltet, dass die Strähnen sich nur langsam vermischen. Dies beeinflusst die NO_x-Emission günstig. Gleichzeitig ist die chemische Kinetik des CO-Ausbrands langsam, so dass die Reaktion sowohl reaktionskinetisch- als auch Mischungskontrolliert sein kann.

Bei Einsatz des Eddy-Dissipation-Concept war die Numerik der Simulationen jedoch so instabil, dass es nicht weiter verwendbar war.

Daher wurde zur Beschreibung der Reaktionsgeschwindigkeiten beim Vierschritt-Schema ein Ansatz verwendet, der zwei konkurrierende Reaktionsraten berechnet und die kleinere als die maßgebliche betrachtet. Bei diesen Reaktionsraten handelt es sich um:

- die Mischungskontrollierte Umsatzrate nach dem Eddy-Dissipation-Modell (Abschnitt 2.5.2.2)

und

- die reaktionskinetische Umsatzrate nach den experimentell ermittelten Arrhenius-Ansätzen von Jones und Lindstedt [Jones88.01].

$$\dot{R}_i = \min(\dot{R}_{i,kin}, \dot{R}_{i,EDM})$$

Gleichung 4-2

mit

\dot{R}_i : effektive Rate der Reaktion i

$\dot{R}_{i,kin}$: reaktionskinetische Rate der Reaktion i

$\dot{R}_{i,EDM}$: Mischungskontrollierte Rate der Reaktion i

Bei diesem Ansatz ist weitgehend gewährleistet, dass sowohl bei niedriger Turbulenz (gleichbedeutend mit langsamer Reaktanden-Vermischung) und schneller Kinetik als auch bei hoher Turbulenz und langsamer Kinetik kein zu hoher Umsatz berechnet wird. Eine Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen Turbulenz und Reaktionskinetik ist dabei nicht möglich.

Durch die zusätzliche Berechnung der Reaktionskinetik unter Berücksichtigung der Rückreaktionen und die Einführung weiterer Gasphasenspezies (CH₄ und H₂) erhöhte sich der Rechenaufwand gegenüber dem Zweischritt-Schema um ca. 40%.

4.1.3 Calcinierung des Kalkmehlpartikels

Eine Übersicht über Modelle der Calcinierung des Kalkmehls und der Sulfatierung und Versinterung des entstandenen Branntkalks gibt Mohr [Mohr01.01].

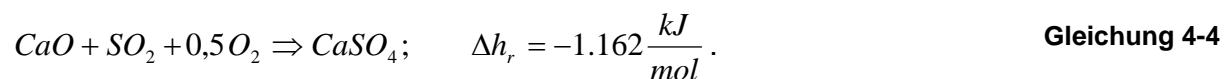
Das einfachste Modell zur Beschreibung des Calcinierungsvorgangs unterstellt, dass die Calcinierung, also die Umwandlung des Kalkmehls in Branntkalk, nach



ausschließlich reaktionskinetisch kontrolliert ist. Zur Beschreibung der Reaktionsgeschwindigkeit wird ein Arrhenius-Ansatz verwendet [Giddi00.01]. Das freigesetzte CO₂ wird in die Gasphase einbilanziert und das Partikelgewicht bei der Lagrange-Betrachtung (Abschnitt 2.3.1) entsprechend reduziert.

Von Vonderbank [Vonde93.01] stammt ein komplexerer Ansatz: Die Kalkmehlpartikel sind porös, daher kann die tatsächliche Calcinierungsgeschwindigkeit durch die Diffusion des CO₂ in den Poren begrenzt sein. Ebenso kann der Stoffübergang des CO₂ an der Partikeloberfläche in die Gasphase der geschwindigkeitsbestimmende Schritt sein.

Zusätzlich reagiert der Branntkalk mit dem SO₂ im Rauchgas, das aus der Verbrennung der schwefelhaltigen Kohle stammt, zu Calciumsulfat nach



Die Sulfatphase ist wesentlich dichter als die poröse Oxidphase, daher ist in sulfatierten Bereichen des Korns der Diffusionskoeffizient des CO₂ kleiner als in den Kornbereichen, in denen eine oxidische Phase vorliegt. Der Porendurchmesser und die aktive Oberfläche der Kalkmehlpartikel werden im Verlauf der Calcinierung infolge einer Versinterung der porösen Partikel kleiner.

Die Beschreibung dieser Vorgänge erfolgt beim Modell von Vonderbank mit einem Shrinking-Core-Modell (Kern-Schale-Modell), das nach einer Untersuchung von Severin et al. [Sever05.02, Sever05.01] zur Beschreibung der einzelnen Vorgänge beim Calcinierungsprozess besonders geeignet ist. Nach dem Shrinking-Core-Modell ist das Kalkmehlpartikel eine Kugel, deren Kern von den inerten Bestandteilen (silizium- und aluminiumoxidischen Verbindungen) gebildet wird.

Dieser Kern ist von einer CaCO_3 -Schale umgeben, die wiederum von einer CaO -Schale ummantelt ist. Die äußere Schale des Partikels besteht aus einer CaSO_4 -Schicht. Im Verlauf des Calciniervorgangs wandern die Reaktionsfronten zwischen den Schalen von außen ins Korninnere; die an den chemischen Reaktionen beteiligten Gase CO_2 und SO_2 diffundieren durch die Schalen hindurch (Abbildung 4-1).

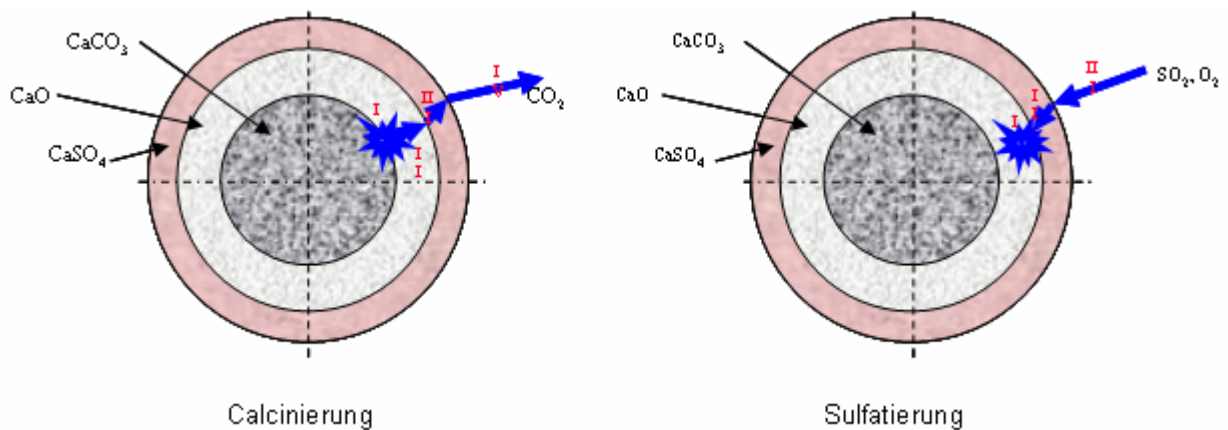


Abbildung 4-1: Shrinking-Core-Modell zur Beschreibung von Calcinierung und Sulfatierung

Die Geschwindigkeit der Calciniereaktion wird bei dem Modell von Vonderbank durch die Kopplung von vier Reaktionswiderständen, wie in Abbildung 4-1 dargestellt, ermittelt.

$$\frac{\partial m_{\text{CaCO}_3}}{\partial t} = -\pi d_{\text{CaCO}_3}^2 M_{\text{CaCO}_3} \frac{c_{\text{CO}_2,s1} - c_{\text{CO}_2,\infty}}{\sum_{i=1}^4 R_{i,C,ST}} \quad \text{Gleichung 4-5}$$

mit

m_{CaCO_3} : Masse des CaCO_3 im Partikel [kg]

d_{CaCO_3} : Durchmesser des Kalkmehl-Partikels [m]

M_{CaCO_3} : Molmasse des CaCO_3 (0,1 kg/mol)

$c_{\text{CO}_2,s1}$: CO_2 -Konzentration an der Oberfläche der CaCO_3 -Schale [mol/m^3]

$c_{\text{CO}_2,\infty}$: CO_2 -Konzentration in der Gasphase [mol/m^3]

$R_{i,C,ST}$: Reaktionswiderstand [s/m]

Dies sind im Einzelnen der kinetische Widerstand der Carbonatumwandlung (Gleichung 4-6), der Widerstand gegen Diffusion durch die poröse CaO -Schicht (Gleichung 4-7), der Widerstand gegen Diffusion durch die CaSO_4 -Schicht (Gleichung 4-8), sowie der Widerstand gegen Diffusion durch den Grenzfilm in die Gasphase (Gleichung 4-9).

$$R_{1,C,ST} = \frac{1}{k_{RC,CaCO_3} Y_{T,C} Y_{D,C}} \quad \text{Gleichung 4-6}$$

$$R_{2,C,ST} = \frac{1}{2} \frac{d_{s1} (d_{s2} - d_{s1})}{d_{s2} D_{CO_2,CaO}^{eff}} \quad \text{Gleichung 4-7}$$

$$R_{3,C,ST} = \pi \frac{d_{s1}^2 z_s}{Y_{D,S} A_S D_{CO_2,CaSO_4}^{eff}} \quad \text{Gleichung 4-8}$$

$$R_{4,C,ST} = \frac{d_{s1}^2}{Sh d_p D_{CO_2,Gas}} \quad \text{Gleichung 4-9}$$

mit

$k_{RC,CaCO_3}$: Reaktionsgeschwindigkeit der Calcinierungsreaktion (Gleichung 4-3) [m/s]

$Y_{T,C}$: Temperatur-Korrekturfunktion der Calcinierungsreaktion [-]

$Y_{D,C}$: Durchmesser-Korrekturfunktion der Calcinierungsreaktion [-]

$Y_{D,S}$: Temperatur-Korrekturfunktion der Sulfatierungsreaktion [-]

d_{s1} : Durchmesser der $CaCO_3$ -Schale [m]

d_{s2} : Durchmesser der CaO -Schale [m]

z_s : Dicke der $CaSO_4$ -Schicht [m]

A_S : Aktive Oberfläche der $CaCO_3$ -Schale [m²]

$D_{CO_2,CaO}^{eff}$: Effektiver Diffusionskoeffizient des CO_2 in der CaO -Schale [m²/s]

$D_{CO_2,CaSO_4}^{eff}$: Effektiver Diffusionskoeffizient des CO_2 in der $CaSO_4$ -Schale [m²/s]

$D_{CO_2,Gas}$: Diffusionskoeffizient des CO_2 in der Gasphase [m²/s]

Sh : Sherwood-Zahl des Kalkmehl-Partikels [-]

In die Berechnung des reaktionskinetischen Widerstands und der Diffusionswiderstände gehen semiempirische Korrekturfunktionen ein. Die effektiven Diffusionskoeffizienten in den CaO - und $CaSO_4$ -Schichten werden jeweils als kombinierter Diffusionskoeffizient aus molekularer Diffusion und Knudsen-Diffusion (Gleichung 4-10) bestimmt (Gleichung 4-11). Die Bestimmung des molekularen Diffusionskoeffizienten von CO_2 in den Poren erfolgt dabei mit einem empirischen Polynom.

$$D_{Kn,CO_2} = 97.0 \bar{r}_{pore} \sqrt{\frac{T_p}{M_{CO_2}}}$$

Gleichung 4-10

$$D_{CO_2, CaO}^{eff} = \frac{\varepsilon_{CaO}}{\tau^2} \left(\frac{1}{D_{mol, CO_2}} + \frac{1}{D_{Kn, CO_2}} \right)^{-1}$$

Gleichung 4-11

mit

- \bar{r}_{pore} : Radius der Kalkmehlporen [m]
- T_p : Partikeltemperatur [K]
- M_{CO_2} : Molmasse des CO₂ [mol/kg]
- ε_{CaO} : Porosität des CaO [-]
- τ : Tortuositätsfaktor [-]
- D_{mol, CO_2} : molekularer Diffusionskoeffizient des CO₂ [m²/s]
- D_{Kn, CO_2} : Knudsen-Diffusionskoeffizient des CO₂ [m²/s]

In Abbildung 4-2 sind die Größen der Reaktionswiderstände R₁ bis R₄ zu Beginn der Calciniierung unter typischen Calcinatorbedingungen logarithmisch dargestellt. Der Widerstand der kinetischen Reaktion, R₁, ist der mit Abstand größte, dies bedeutet, dass am Anfang des Calciniervorgangs die Geschwindigkeit der Calciniierung von der chemischen Reaktion (Gleichung 4-3) begrenzt wird. Im weiteren Verlauf des Calciniervorgangs nimmt R₁ ab, während R₂ bis R₄ größer werden.

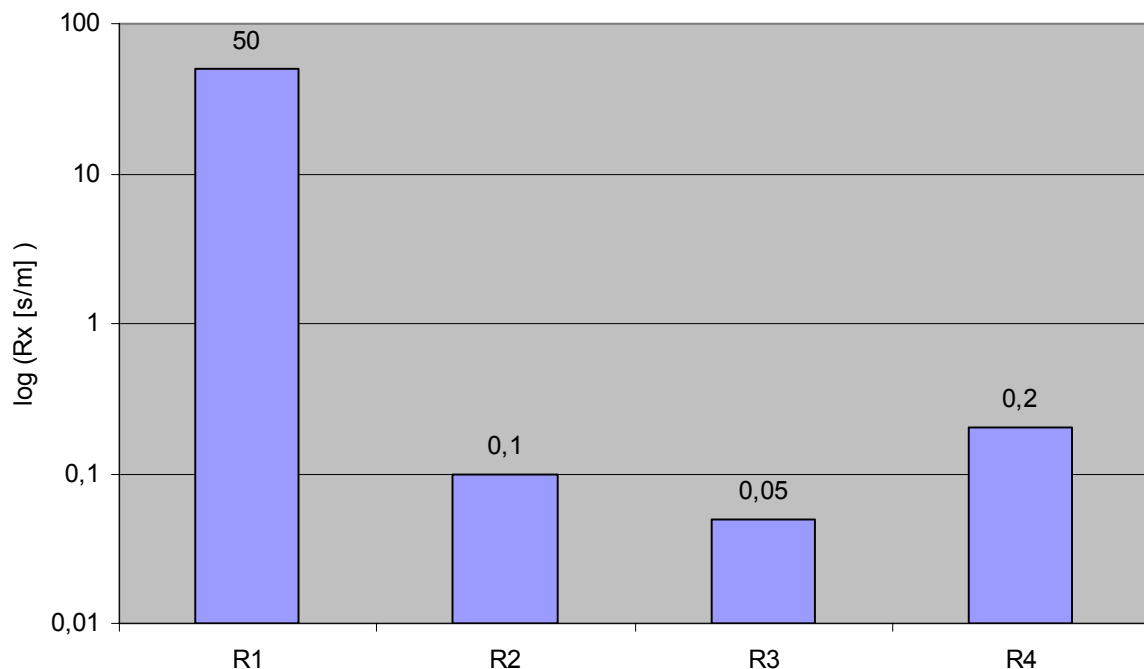


Abbildung 4-2: Reaktionswiderstände R₁ bis R₄ der Calciniierungsreaktion am Anfang des Calciniierungsvorgangs

Die Beschreibung der Sulfatierung erfolgt analog:

$$\frac{\partial m_{CaSO_4}}{\partial t} = M_{CaSO_4} \frac{c_{SO_2,s2} Y_{D,S} Y_{H_2O}}{\sum_{i=1}^3 R_{i,S,ST}} \quad \text{Gleichung 4-12}$$

Die Reaktionsgeschwindigkeit wird durch die Kopplung der drei Widerstände von chemischer Reaktion (Gleichung 4-13), Diffusion durch die CaSO₄-Schicht (Gleichung 4-14) und der Diffusion durch die Grenzschicht der Gasphase (Gleichung 4-15) berechnet. Dabei werden erneut mehrere Korrekturfunktionen verwendet.

$$R_{1,S,ST} = \frac{1}{k_{R,S,CaSO_4} Y_{T,S} A_S} \quad \text{Gleichung 4-13}$$

$$R_{2,S,ST} = \frac{1}{Y_D D_{SO_2,CaSO_4}^{eff} A_S} z_S \quad \text{Gleichung 4-14}$$

$$R_{3,S,ST} = \frac{1}{Sh d_p D_{SO_2,gas}} \quad \text{Gleichung 4-15}$$

Die Sulfatierung verläuft unter den im Calcinator vorliegenden Bedingungen deutlich langsamer als die Calcinierung. Weiterhin ist der Sulfatierungsgrad von der Menge des vorhandenen SO₂ abhängig, die wiederum vom Schwefelgehalt der eingesetzten Brennstoffe bestimmt wird. Unter Berücksichtigung der auftretenden Brennstoff- und Kalkmehlmassenströme im Calcinator kann davon ausgegangen werden, dass sich nur eine relativ dünne CaSO₄-Schicht bildet. Es ist aber nicht auszuschließen, dass bei einem Brennstoff mit hohem Schwefelgehalt eine starke Sulfatierung stattfindet, so dass die Calcinierungsreaktion dann merklich langsamer abläuft und der Entsäuerungsgrad des Kalkmehls verringert wird. Daher sollte die Sulfatierung berücksichtigt werden.

Abbildung 4-3 zeigt den Calcinierungsgrad in Simulationen von Fallrohrreaktorversuchen bei unterschiedlichen Konzentrationen von SO₂ in der Gasphase. Die Geschwindigkeit der Calcinierung wird durch die Sulfatierung verringert. Dieser Effekt hat aber erst bei sehr hohen SO₂-Konzentrationen in der Gasphase deutliche Auswirkungen. Bei SO₂ Konzentrationen, wie sie in Kohlefeuerungen typischerweise vorkommen (0,1 Vol.-%, entsprechend ca. 3 g/m³ i. N. Rauchgas), sind die Auswirkungen auf die Sulfatierung nur sehr gering.

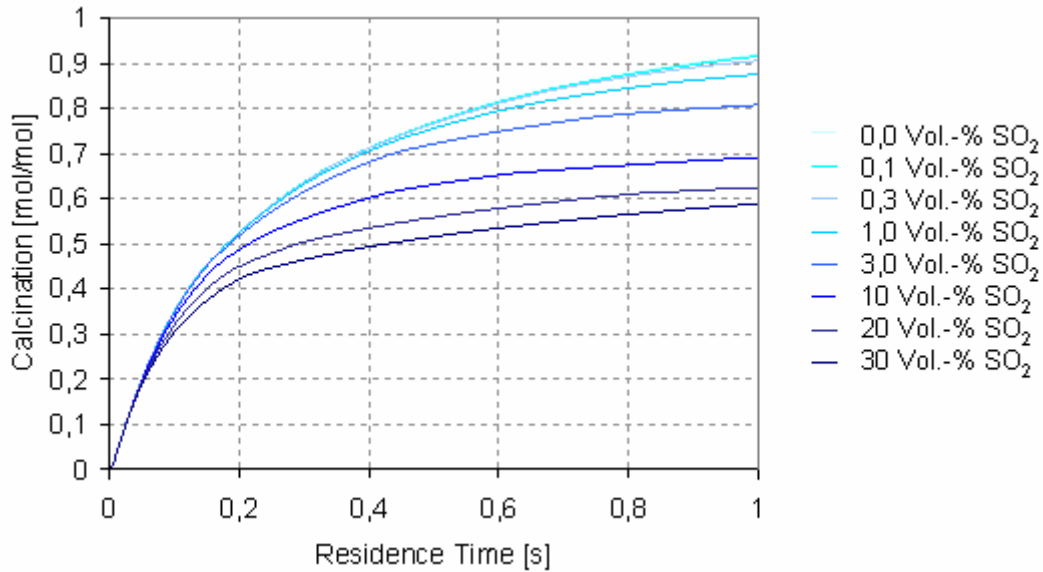


Abbildung 4-3: Calciniierungsgrad bei unterschiedlichen Molanteilen von SO₂ [Bluhm06.01]

Ein weiterer unerwünschter Effekt, der vom Vonderbank-Modell berücksichtigt wird, ist die Versinterung des ursprünglich porösen Partikels. Das CaO bildet bei der Calciniierung zunächst eine Schicht von feinen Körnchen, die sich um den weniger porösen CaCO₃-Kern herum anlagern. Diese versintern infolge der hohen Temperatur im Calcinator, wodurch die Porosität der CaO-Schicht sinkt und der Diffusionswiderstand für CO₂ und SO₂ zunimmt. Gleichzeitig nimmt der Partikeldurchmesser ab.

Dieser Prozess wird mit dem Versinterungsmodell nach Silcox [Silco89.01] beschrieben. Es verwendet einen Arrhenius-Ansatz zur Modellierung der Versinterungsreaktion, mit dem die Abhängigkeit der Versinterung von Temperatur und Verweilzeit berücksichtigt wird. Die Abnahme der spezifischen Oberfläche wird nach Gleichung 4-16 bestimmt, mit der Geschwindigkeit nach Gleichung 4-17.

$$\frac{dS_{CaO}}{dt} = -k_s (S_{CaO} - S_{CaO,min})^2 \quad \text{Gleichung 4-16}$$

$$k_s = A \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \exp\left(\frac{B p_{CO_2}^n}{RT}\right) \quad \text{Gleichung 4-17}$$

mit

$S_{CaO,min}$: minimale spezifische Oberfläche des Kalkmehls; 5.000 [m²/kg]

A : 286 [kg/(m² s)]

n : -0,111

B : -314 [atm m³/kmol]

E_A : Aktivierungsenergie; 120,55 [kJ/(mol K)]

p_{CO_2} : Partialdruck des CO₂ in der Gasphase [atm]

R : universale Gaskonstante; 8,314 [J/(K mol)]

T : Partikeltemperatur [K]

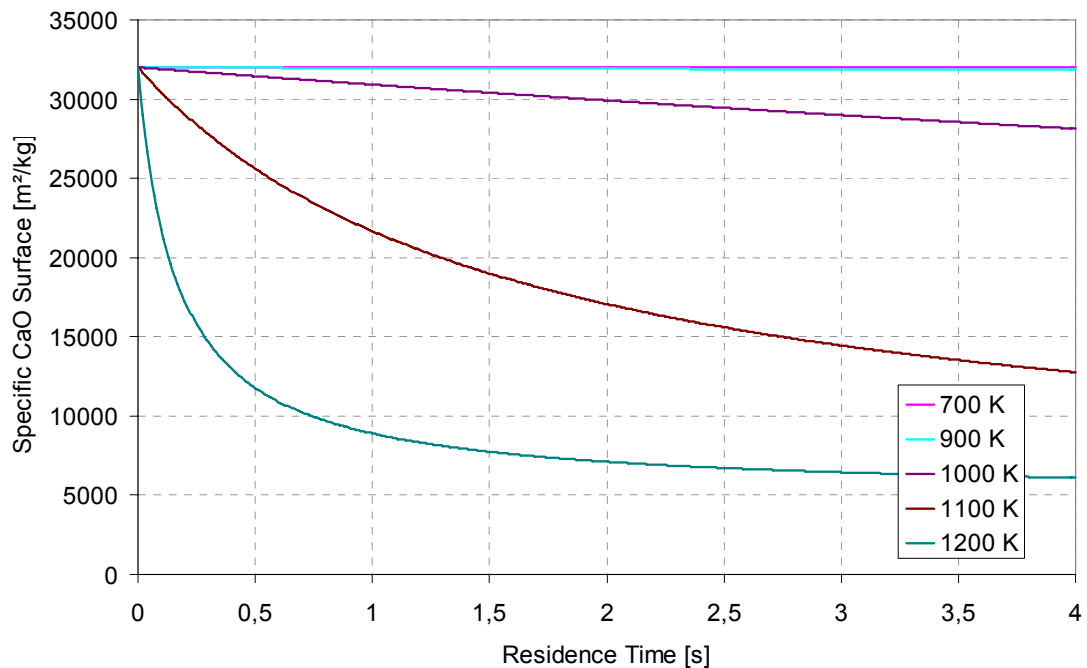


Abbildung 4-4: Verweilzeit- und Temperaturabhängigkeit der spezifischen Oberfläche von CaO [Bluhm06.01]

In Abbildung 4-4 ist die Abnahme der spezifischen CaO-Oberfläche für verschiedene Temperaturen dargestellt. Dort ist die starke Temperaturabhängigkeit der Versinterung zu erkennen. Während bei 900 K die spezifische Oberfläche nach einer Verweilzeit von 4 Sekunden nur unwesentlich abnimmt, ist bei 1100 K (Betriebstemperatur des Calcinators) nur noch ein Drittel der ursprünglichen spezifischen Oberfläche vorhanden. In Abbildung 4-5 ist die Porosität von CaO in Abhängigkeit von der spezifischen Oberfläche dargestellt.

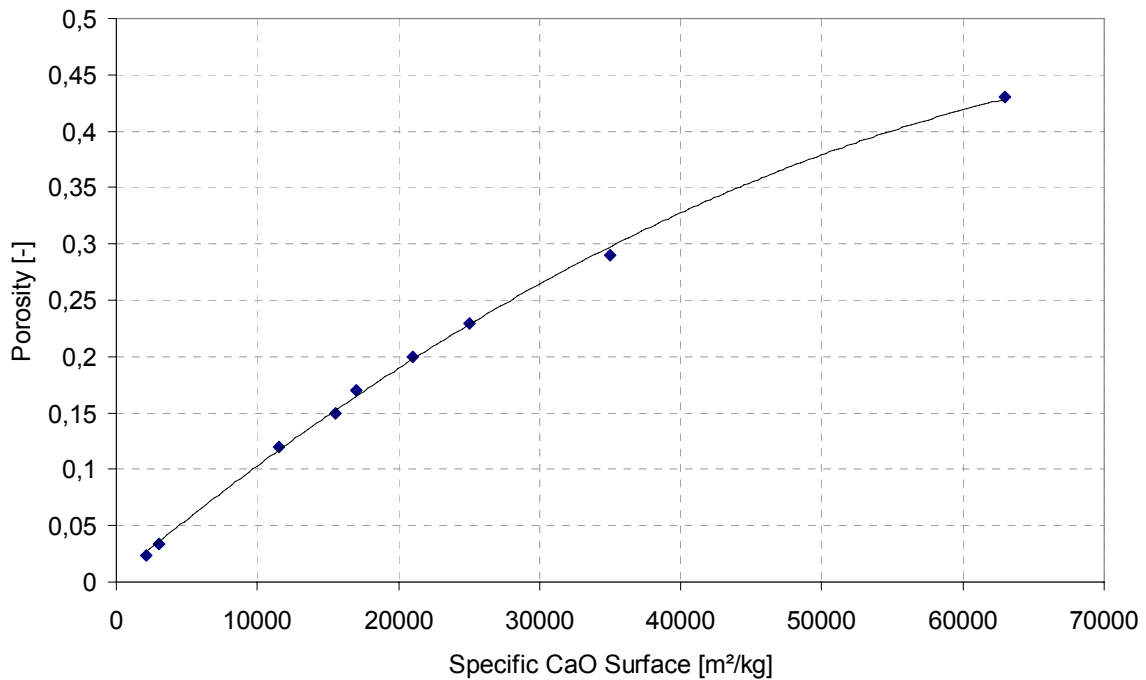


Abbildung 4-5: Zusammenhang von Porosität und spezifischer Oberfläche von CaO [Bluhm06.01]

Durch die Erweiterung des Shrinking-Core-Modells um die Versinterung wird der Partikeldurchmesser der Kalkpartikel nicht mehr als konstant betrachtet. Die Änderung von Durchmesser, Porosität und Dichte im Verlauf der Calcinierung kann damit realitätsnäher wiedergegeben werden.

Abschließend wurden zur Validierung des für FLUENT implementierten Calciniierungsmodells CFD-Simulationen von Fallrohrreaktorexperimenten der IFRF [Flame87.01] durchgeführt. Bei den Experimenten wurde der Calciniierungsgrad von Kalkmehl als Funktion der Verweilzeit im Reaktor ermittelt. Dabei wurden Temperatur und CO₂-Gehalt im Reaktor variiert. Es zeigte sich eine gute Übereinstimmung zwischen Ergebnissen der im Rahmen der vorliegenden Arbeit erfolgten Simulation und IFRF-Messergebnissen.

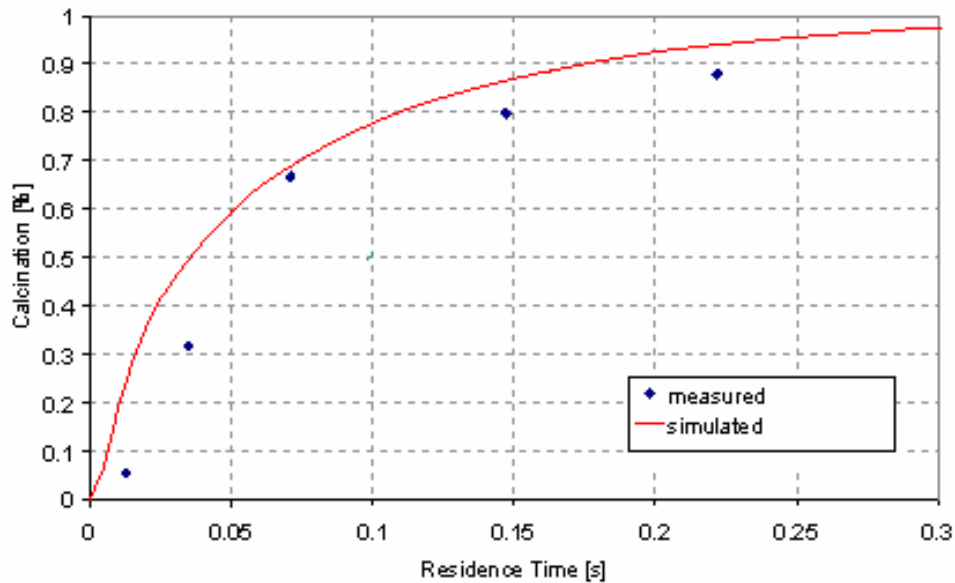


Abbildung 4-6: Calcinierversuch, 14% CO₂, 1100°C [Bluhm06.01]

Der Energie- und Stoffaustausch zwischen Kalkmehlpartikel und umgebender Gasphase wurde mit dem Particle-Source-in-Cell-Verfahren (vgl. Abschnitt 2.3.1) modelliert. Dabei werden die entsprechenden Quell- oder Senkenterme für die Gasphase gesetzt.

4.1.4 Turbulenzmodulation

Die Bedeutung der Turbulenzmodulation für den Vorcalcinierversuch wurde in Abschnitt 3.3 bereits diskutiert. Für die Simulationen wurden das Quelltermmodell von Tu und Fletcher sowie der modifizierte Viskositätsansatz nach Görner verwendet, da diese Modelle sich in den Voruntersuchungen als die am besten geeigneten herausgestellt hatten. Zu Vergleichszwecken erfolgten zusätzlich Rechnungen mit dem Standard-k-ε-Modell unter Verwendung der Prandtl-Kolmogorov-Beziehung.

4.1.5 Wärmeübertragung durch Strahlung

Die Beschreibung der Strahlungswärmeübertragung kann grundsätzlich mit den in Abschnitt 2.4.1 vorgestellten Strahlungsmodellen erfolgen. Das Rosseland-Modell basiert auf verschiedenen Annahmen, die nur für optisch dichte Medien erfüllt sind. Es verlangt nur einen geringen Rechenaufwand und ist zur Beschreibung der optisch dichten Zweiphasenströmung im Calcinator besonders geeignet [Fluen07.01].

Die hohe Beladung der Gasphase mit Partikeln im Calcinator bewirkt eine Änderung des Wärmestrahlungs- und Streuverhaltens der Dispersion gegenüber dem partikellosen Fall. Die Partikel absorbieren einen Teil der auftreffenden Wärmestrahlung, erwärmen sich und emittieren in Folge selbst Wärmestrahlung. Da Partikel wesentlich stärker als Gase emittieren, wird durch die Partikelphase die Wärmeübertragung durch Strahlung wesentlich verstärkt. Zusätzlich treten an den Partikeln Beugungs- und Streueffekte auf. Im Grenzfall einer extrem hoch beladenen Gasphase ist der Strahlungswärmeaustausch zwischen benachbarten Partikeln dominierend, während der Einfluss der Gasphase auf die Strahlung geringer wird.

Zur Beschreibung des Strahlungs- und Streuverhalten eines optischen Mediums wird nicht nur ein Strahlungsmodell, sondern auch ein Modell zur Beschreibung der Stoffwerte Absorptionskoeffizient und Streukoeffizient benötigt. Das in Abschnitt 2.4.2 beschriebene wsgg-Modell zur Bestimmung des Absorptionskoeffizienten der Gasphase berücksichtigt den Einfluss der Partikel auf die Strahlungseigenschaften nicht.

Zur Beschreibung der Strahlungseigenschaften der Dispersion, d. h. zur Bestimmung von Absorptions- und Streukoeffizient, wurde ein von Biermann [Bie69.01], Brummel [Brumm95.01] und Neubronner [Neubr95.01] ursprünglich für die Kraftwerkstechnik entwickeltes Verfahren adaptiert und implementiert. Nach diesem berechnen sich der Absorptions- bzw. Streukoeffizient der Dispersion wie folgt:

$$K_i = K_{i,Gas} + N_t C_i \quad \text{Gleichung 4-18}$$

mit

- K_i : Absorptions- bzw. Streukoeffizient [1/m]
- i : Index für Absorption ($i = a$) oder Streuung ($i = s$)
- N_t : Partikelanzahl [$1/m^3$]
- C_i : Wirkungsquerschnitt für Absorption bzw. Streuung [m^2]

Der Wirkungsquerschnitt C_i eines Partikels berechnet sich aus:

$$C_i = Q_i A_q \quad \text{Gleichung 4-19}$$

mit

- Q_i : relativer, partikelgrößenabhängiger Wirkungsquerschnitt [-]
- A_q : Partikelquerschnitt [m^2]

Übertragen auf eine polydisperse Dispersion mit n Partikelklassen ergibt sich damit der Ausdruck für Absorptions- und Streukoeffizient wie folgt:

$$K_i = K_{i,Gas} + \sum_{j=1}^n Q_{i,j} A_{q,j} N_{t,j} \quad \text{Gleichung 4-20}$$

mit

- i : Index für Absorption ($i = a$) oder Streuung ($i = s$)
- $K_{i,Gas}$: Absorptions- bzw. Streukoeffizient des Gases [1/m]
- $Q_{i,j}$: relativer Wirkungsquerschnitt der Partikelgrößenklasse j für Absorption bzw. Streuung [-]
- $A_{q,j}$: Partikelquerschnitt der Partikelgrößenklasse j [m^2]
- $N_{t,j}$: Anzahldichte der Partikel der Partikelgrößenklasse j [$1/m^3$]

Die relativen Wirkungsquerschnitte von Kohle wurden verschiedentlich untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass sie in hohem Maße von der Zusammensetzung der Kohlepartikel abhängen, d. h. auch von den inerten Bestandteilen wie SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , CaO beeinflusst werden. Neubronner konnte einen empirischen Ansatz entwickeln, der die relativen Wirkungsquerschnitte von Kohlepartikeln als Funktion

des Massenanteils der genannten Komponenten und des Partikeldurchmessers beschreibt.

Als Schwierigkeit bei der Modellierung der Strahlungseigenschaften der Kalkmehl-Dispersion erwies sich das Fehlen hinreichend genauer Stoffwerte, die es gestattet hätten, die sich im Verlauf des Calcinierungs- und Sulfatierungsvorgangs des Kalkmehls ändernden optischen Eigenschaften des Kalkmehls zu berücksichtigen. Aus dem gleichen Grunde erwies sich die Berücksichtigung des Einflusses der Kalkmehl-Inerte auf die optischen Eigenschaften als nicht möglich. Es wurden schließlich Stoffwerte von Kalkmehl-Partikeln aus Experimenten an Wirbelschichtfeuerungen verwendet [Brumm06.01]. Bei diesen ist zu berücksichtigen, dass sie im Mittel einen beträchtlich größeren Durchmesser als das Kalkmehl im Calcinator aufweisen und zusätzlich in viel höherem Maße sulfatiert sind. Die vorhandenen Stoffwerte wurden in den hier interessierenden Bereich von Partikelgrößen kleiner $150\ \mu\text{m}$ extrapoliert. Die so generierten optischen Stoffwerte für Kalkmehl sind prinzipbedingt als sehr unsicher anzusehen. Die extrapolierten Werte sind in Abbildung 4-7 dargestellt.

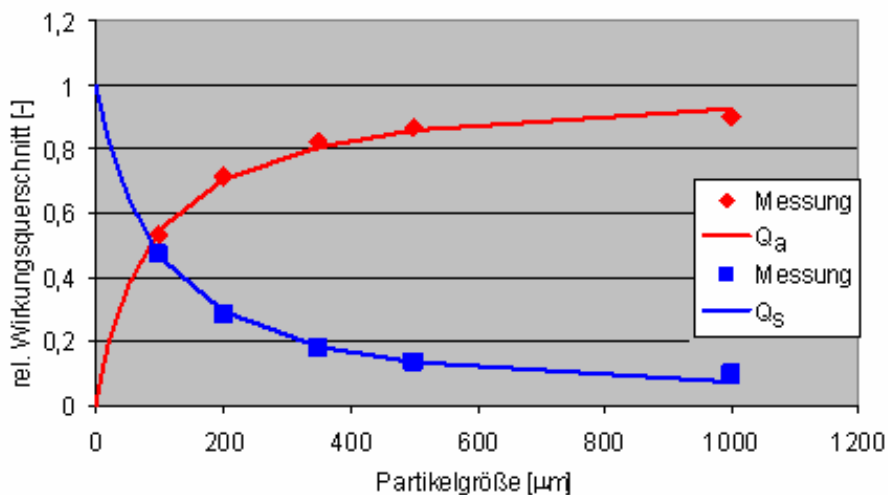


Abbildung 4-7: Extrapolierte Werte für die relativen Wirkungsquerschnitte für Absorption und Streuung

Das entsprechend angepasste Modell wurde implementiert und anschließend mit diesem Modell Simulationen der Strahlungsverhältnisse bei der Calcinierung von Kalkmehl in einem Laborreaktor durchgeführt. Insbesondere wurde der Einfluss von Partikelgrößenverteilung und Gasphasenbeladung auf die berechneten Werte von Absorptions- und Streukoeffizient untersucht. Auf die Validierung des Modells mittels in der Literatur veröffentlichter Messungen musste aus Mangel an geeigneten Daten verzichtet werden.

In Abbildung 4-8 sind beispielhaft Ergebnisse für eine Modellrechnung mit einem Partikeldurchmesser von $10\ \mu\text{m}$ und einer Beladung von $1\ \text{kg Mehl}/\text{m}^3$ Gas in einem Axialschnitt dargestellt. Die Partikel treten - gleichmäßig über den Querschnitt verteilt - von oben in den Reaktor ein und durchlaufen ihn nach unten. Infolge der gleichmäßigen Partikeldispersion sind die optischen Eigenschaften verhältnismäßig homogen verteilt. Im Calcinator hingegen tritt Strahlenbildung auf, wodurch die Strahlungseigenschaften örtlich stark variieren können.

Der Verlauf von Absorptions- und Streukoeffizient im Calcinator wird in

Abbildung 4-9 und Abbildung 4-10 dargestellt. In den Bereichen, in denen hohe Feststoffkonzentrationen vorliegen (Brenner, Mehleinträge, Gebiete mit Strähnenbildung) nehmen beide Größen hohe Werte an. Die stochastische Natur des Discrete-Random-Walk-Modells (vg. Abschnitt 2.3.2), mit dem die Partikelbahnen beschrieben werden, äußert sich in der diskreten Verteilung von Absorptions- und Streukoeffizient.

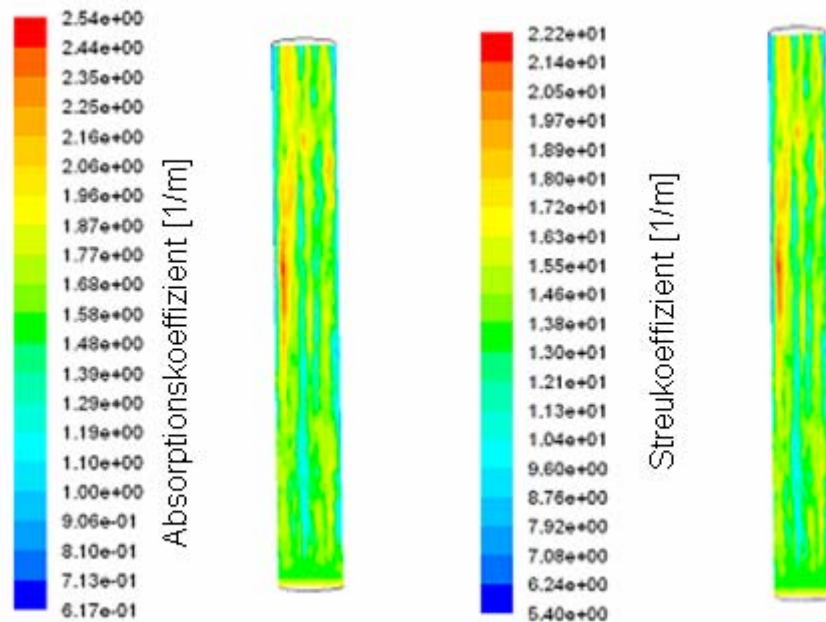


Abbildung 4-8: Berechneter Absorptionskoeffizient (links) und Streukoeffizient (rechts) im Laborreaktor; Beladung 1 kg/kg

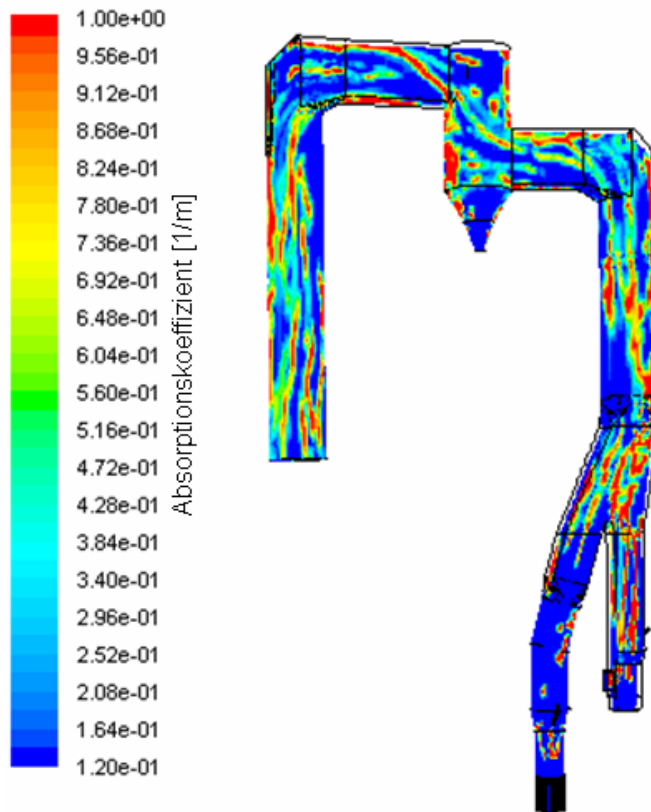


Abbildung 4-9: Verlauf des Absorptionskoeffizienten im Calcinator unter Einfluss der Partikelstrahlen

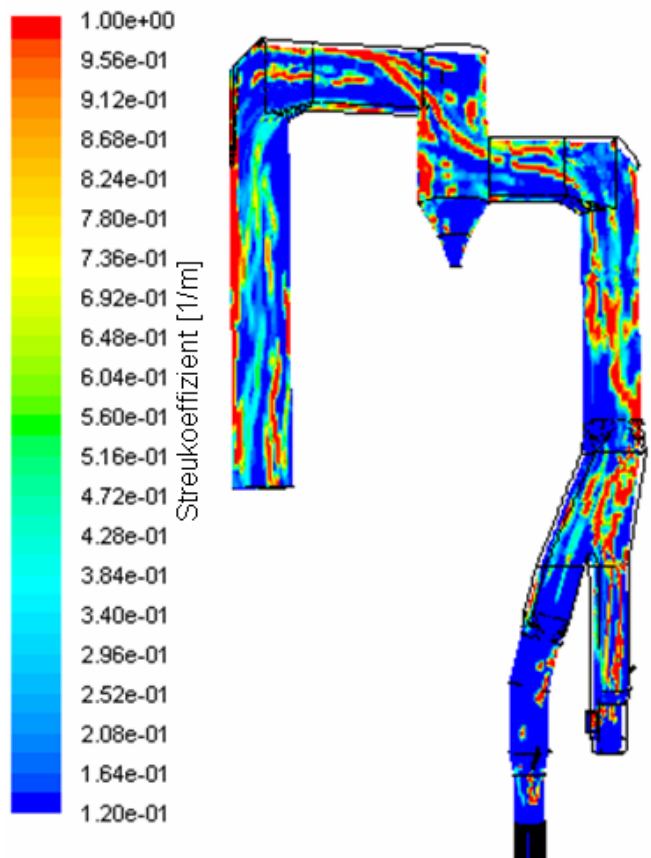


Abbildung 4-10: Verlauf des Streukoeffizienten im Calcinator unter Einfluss der Partikelstrahlen

4.2 Übersicht über Arbeiten anderer Autoren zur CFD-Simulation des Vorcalcinierprozesses

CFD-Simulationen von Vorcalcinatoren sind in der Vergangenheit u. a. von Giddings [Giddi00.01], Mohr [Mohr01.01] und Huang et al. [Huang06.01] durchgeführt worden.

Giddings simulierte im Rahmen seiner Dissertation einen mit Kohle befeuerten Vorcalcinator mit dem CFD-Code FLUENT®. Hauptziel der Arbeit war neben dem Nachweis der grundsätzlichen Durchführbarkeit von CFD-Simulationen des Vorcalcinierprozesses die Untersuchung der Partikeldispersion im Apparat. Zu diesem Zweck variierte er den Ort der Kalkmehl- und Brennstoffaufgabe und berechnete die hieraus resultierenden Partikelbahnen. Zur Validierung der Simulationsergebnisse wurden an verschiedenen Stellen im Vorcalcinator durch Mannlöcher Geschwindigkeitsmessungen mit einem Pitot-Rohr und Wandtemperaturmessungen mit einem Infrarot-Thermometer durchgeführt. Zusätzlich wurde der Calcinierungsgrad des Kalkmehls am Calcinator-Eintritt und -Austritt gemessen. Obwohl Giddings (vermutlich aus Ressourcengründen) ein Gitter mit nur 48.000 Zellen für die Simulationen verwendete, stimmten die Simulationsergebnisse tendenziell mit den Messwerten überein. Von Giddings durchgeführte Sensitivitätsanalysen lieferten Ergebnisse, die qualitativ den Erwartungen entsprachen. Damit war ihm der Nachweis gelungen, dass der Vorcalcinierprozess trotz seiner Komplexität grundsätzlich mit CFD simuliert werden kann.

Die Beschreibung der Turbulenz erfolgte mit dem Standard-k- ϵ -Modell. Die Turbulenzmodulation wurde nicht berücksichtigt. Der Calcinierungsvorgang am Einzelkorn wurde als ausschließlich kinetisch kontrollierter Entsäuerungsverfahren nach Gleichung 4-3 modelliert, die Sulfatierung und Versinterung des Kalkmehlparkels wurden nicht betrachtet.

Schwerpunkt der Dissertation von Mohr [Mohr01.01] war die Untersuchung unterschiedlicher Ansätze zur Beschreibung der kombinierten Calcinierungs- und Sulfatierungsreaktionen im Kalkmehl-Partikel. Zu diesem Zweck implementierte er verschiedene Submodelle zur Calcinierung, Sulfatierung und Versinterung des Kalksteins. Anschließend verglich er Ergebnisse von Laborexperimenten zu diesen Vorgängen mit entsprechenden CFD-Simulationsergebnissen. Insbesondere verglich er ein Shrinking-Core-Modell (Kern-Schale-Modell) mit einem Korn-Schale-Modell.

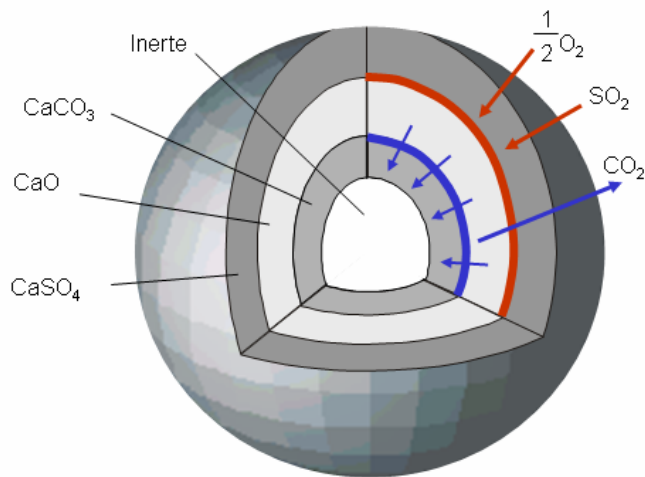


Abbildung 4-11: Shrinking-Core-Modell (Kern-Schale-Modell) für Kalkmehl beim Calcinierprozess [Sever05.01, Sever05.02]

Das Korn-Schale-Modell behandelt einzelne Kalksteinpartikel als Körper mit homogener Materialverteilung. Im Verlauf der Calcinierung wandern die Reaktionsfronten wie beim Shrinking-Core-Modell (Abschnitt 4.1.3) ins Korninnere. Das verbleibende Calciumoxid wird als eine poröse Schicht einzelner CaO-Subkörner betrachtet (Abbildung 4-12). Porosität, aktive Oberfläche und Durchmesser des Kalkmehlpartikels ergeben sich aus geometrischen Überlegungen. Eine Angabe darüber, ob das Korn-Schale-Modell oder das Shrinking-Core-Modell den realen Calcinierprozess besser beschreibt, erfolgt in der Arbeit jedoch nicht.

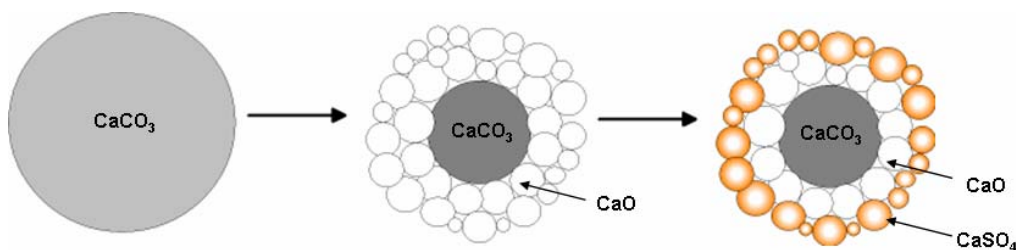


Abbildung 4-12: Korn-Schale-Modell für Kalkmehl [Sever05.01, Sever05.02]

Zur Validierung seiner Simulationen standen Mohr Profilmessungen der wesentlichen Gasphasenspezies in Vorcalcinator und Gastemperaturen zur Verfügung.

Mohr stellte bei seinen CFD-Simulationen fest, dass die berechneten Partikelbahnen des Brennstoffs sehr stark von den tatsächlichen abwichen und dass infolgedessen das berechnete Sauerstoffprofil im Calcinator qualitativ und quantitativ stark vom tatsächlichen abwich. Er führte dies auf das Standard-k-ε-Modell zurück, das er bei seinen Rechnungen benutzt hatte. Aus dem Modell werden Informationen über Größe und Lebensdauer der Turbulenzwirbel gewonnen, die die Partikelbahnen beeinflussen (vgl. Discrete-Random-Walk-Modell, Abschnitt 2.3.2). Mohr zufolge ist durch "die korrigierte Beschreibung der Wirbeldimensionen und -lebensdauern (...)" neben einer verbesserten Beschreibung der turbulenten homogenen Gasphasenreaktionen ein realistischeres Bewegungs- und Reaktionsverhalten der Partikel zu erwarten. Prinzipiell stehen zwar verschiedene Turbulenzmodelle zur Verfügung,

jedoch zeigt leider keines von ihnen ein stabiles Lösungsverhalten, welches den Anforderungen an eine technische Simulation genügen würde".

Huang et al. führten CFD-Simulationen eines Vorcalcinator durch, um den Einfluss der Luft- und Brennstoffstufung auf die NO_x -Emission einer bestehenden Anlage zu untersuchen. Den Calciniervorgang beschrieben sie mit einem Shrinking-Core-Modell, das nur die Umwandlung von CaCO_3 zu CaO betrachtet, wobei die Wanderungsgeschwindigkeit der Reaktionsfront ausschließlich mit einem Arrhenius-Ansatz beschrieben wurde. Die Beschreibung der Turbulenz erfolgte mit einem k - ϵ -Modell, die NO_x -Bildung wurde mit dem Modell von De Soete (vgl. Abschnitt 2.5.3) berechnet. Die für den Calcinatorauslass berechneten Werte für Temperatur, Koks-ausbrand und Calciniierungsgrad stimmten gut mit den Messwerten überein. Trotz der bekannten Schwächen globalkinetischer NO_x -Modelle, zu denen das verwendete Modell nach De Soete gehört, stimmten berechnete und gemessene NO_x -Emissionen überraschend gut überein. Die Autoren kamen zu dem Schluss, dass bei der untersuchten Anlage ein Umbau auf gestufte Brennstoffaufgabe sinnvoll, ein Umbau auf zusätzliche Luftstufung jedoch wirtschaftlich nicht sinnvoll ist.

Die wesentlichen Daten der vorgestellten Simulationen sind in Tabelle 4-1 zusammengefasst. Es ergibt sich, dass im Rahmen der bisherigen Arbeiten die Bedeutung der Turbulenzmodulation für den Calciniervorgang bereits erkannt worden ist. Bislang wurde jedoch keine befriedigende Lösung gefunden, diese im Rahmen einer technischen Simulation zu beschreiben.

	Giddings, 2001	Mohr, 2002	Huang et al., 2006	vorliegende Arbeit, 2007
CFD-Code	FLUENT®	Hochschul-Code LORA	k. A.	FLUENT®
Anzahl der Zellen	48.000	300.000	k. A.	ca. 1.000.000
Kohlemodell	Standardmodelle aus FLUENT	den Standardmodellen aus FLUENT vergleichbar	Pyrolyse: Zweischritt-Modell; Koksabbrand: kinetisches Modell	Standardmodelle aus FLUENT
Chemiemodell	Eddy-Dissipation-Modell	Eddy-Dissipation-Concept	k. A.	kinetisches Modell mit zus. Limitierung des Umsatzes durch das Eddy-Dissipation-Modell
betrachtete Gasphasenspezies	CO ₂ , CO, N ₂ , O ₂ , H ₂ O, Kohleflüchtige	CO ₂ , CO, N ₂ , O ₂ , H ₂ O, CH ₄ , SO ₂ , Kohleflüchtige	k. A.	CO ₂ , CO, N ₂ , O ₂ , H ₂ O, CH ₄ , H ₂ , SO ₂ , Kohleflüchtige
Calcinierungsmodell				
• Calcini- rung	kinetisches Modell, keine Berücksichtigung der Hemmung durch Korndiffusion und Stoffübergang	kinetisches Modell, Berücksichtigung der Hemmung durch Korndiffusion und Stoffübergang mittels Korn-Schale- bzw. Kern-Schale-Modell	kinetisches Korn-Schale-Modell ohne Berücksichtigung der Hemmung durch Korndiffusion und Stoffübergang	kinetisches Kern-Schale-Modell, Berücksichtigung der Hemmung durch Korndiffusion und Stoffübergang
• Sulfatierung	nicht berücksichtigt	kinetisches Modell, Berücksichtigung von Korndiffusion und Stoffübergang mittels Korn-Schale- bzw. Kern-Schale-Modell	nicht berücksichtigt	kinetisches Kern-Schale-Modell, Berücksichtigung der Hemmung durch Korndiffusion und Stoffübergang
• Versinterung	nicht berücksichtigt	berücksichtigt	nicht berücksichtigt	berücksichtigt
Turbulenzmodell	k-ε-Modell	k-ε-Modell	RNG-k-ε-Modell	k-ε-Modell
Beschreibung der Turbulenzmodulation	nicht berücksichtigt	nicht berücksichtigt	nicht berücksichtigt	Quellterme in der k- und ε-Gleichung bzw. beladungsabhängige turbulente Viskosität μ _t .
Strahlungsmodell	Rosseland-Modell	P1-Modell	k. A.	Rosseland-Modell
Partikeleinfluss auf die Strahlung	berücksichtigt	nicht berücksichtigt	k. A.	berücksichtigt
Messwerte zur Validierung	Strömungsgeschwindigkeiten und Wandtemperaturen an mehreren Stellen	Profilmessungen zu Gasphasenspezies und Gastemperaturen Calcinierungsgrad, Koksabbrand	Gastemperatur, Koksabbrand, Calcinierungsgrad, NO _x -Konzentration am Auslass	Profilmessungen zu Gasphasenspezies Gastemperaturen, Koksabbrand

Tabelle 4-1: Veröffentlichungen zur CFD-Simulation des Vorcalcinierprozesses

4.3 Bestimmung der Randbedingungen für die CFD-Simulation

Die Qualität einer CFD-Simulation wird auch durch die gewählten Randbedingungen beeinflusst. Das Ergebnis einer Simulation kann von manchen Randbedingungen nahezu unabhängig sein, während es bereits auf kleine Änderungen anderer Randbedingungen empfindlich reagiert. Manche Randbedingungen des simulierten Prozesses sind genau bekannt oder können durch Messung/Berechnung einfach bestimmt werden, während andere nur mit großen Unsicherheiten abgeschätzt werden können.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein zweisträngiger Calcinator simuliert. An der Realanlage waren im Rahmen von Betriebsversuchen Messungen zur Gasphasenzusammensetzung und Temperatur in der Anlage durchgeführt worden [Boden03.01]. Diese Messergebnisse gestatten eine Beurteilung der Qualität der Simulation.

Bei der Anlage wird ein Strang mit vorgewärmter Umgebungsluft (Tertiärluft), der andere Strang dagegen mit den heißen Drehrohrabgasen beaufschlagt (Abbildung 4-13). Im Drehrohrföfen werden verhältnismäßig inhomogene Sekundärbrennstoffe (u. a. Autoreifen, gewerbliche Reststoffe u. Ä.) thermisch verwertet, so dass die Zusammensetzung des Drehrohr-Rauchgases von der zeitlich stark schwankenden Zusammensetzung des im Drehrohrföfen umgesetzten Brennstoffs bestimmt ist. Daher konnte der Drehrohrföfen während der Messungen an der Anlage nicht auf einem fixen Betriebspunkt betrieben werden, so dass die Zusammensetzung des in den Ofenstrang eintretenden Drehrohr-Rauchgases nicht genau bekannt ist. Abbildung 4-14 zeigt die zeitliche Schwankung der Abgaszusammensetzung des Drehrohrs im Verlauf einiger Stunden bei dem Versuch, das Drehrohr möglichst gleichmäßig zu betreiben.

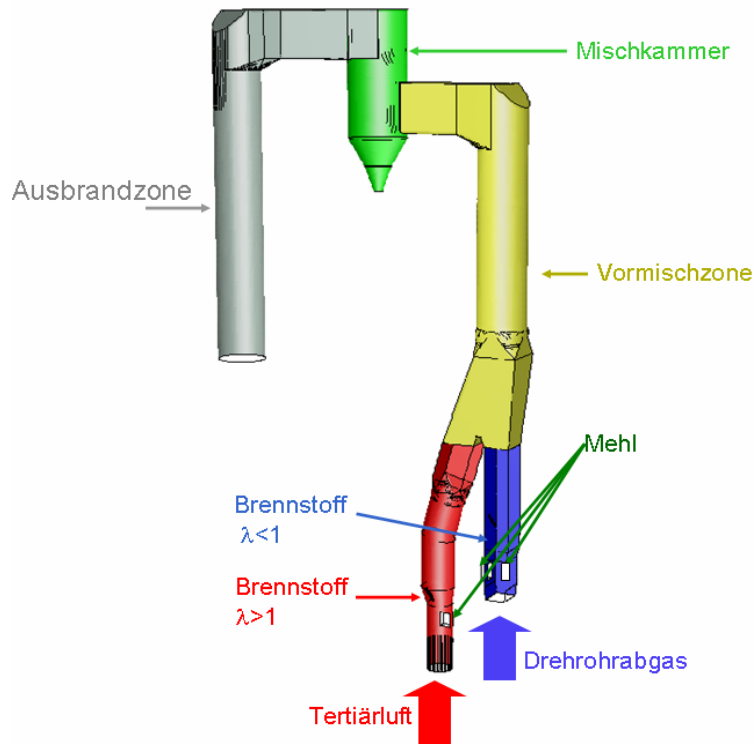


Abbildung 4-13: Ansicht des simulierten Vorcalcinator

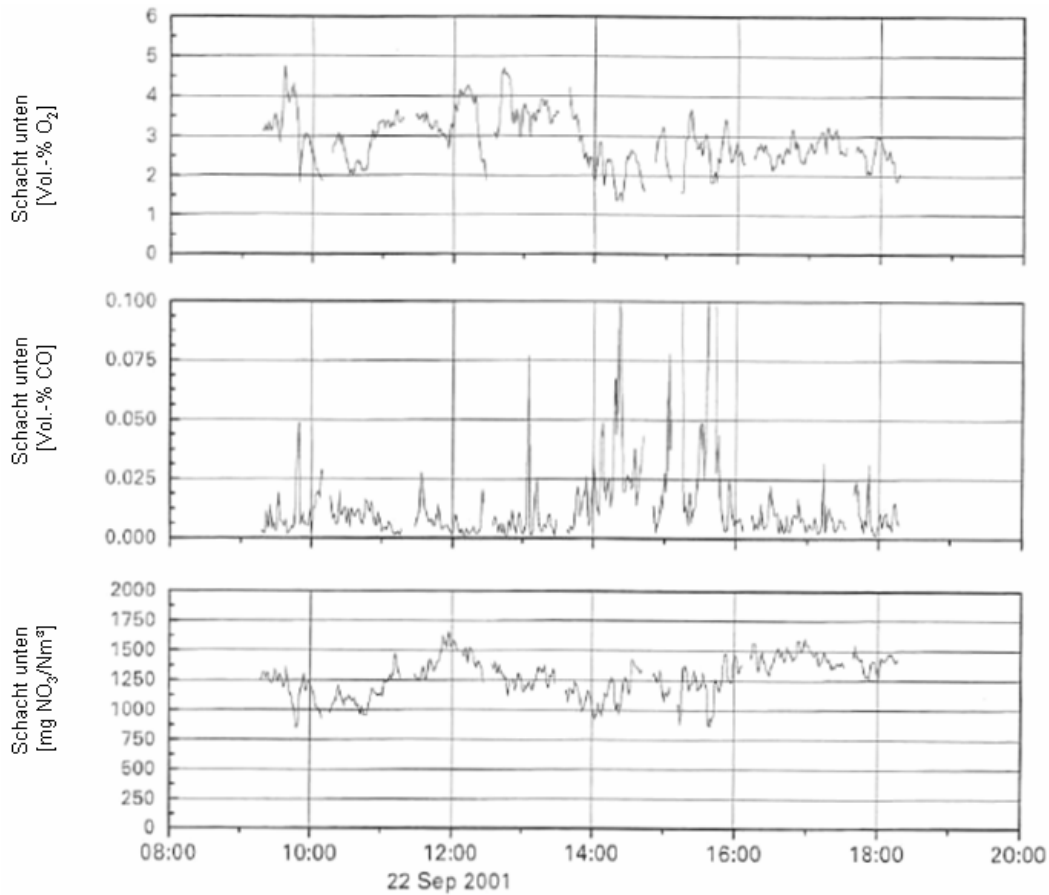


Abbildung 4-14: Tagesverlauf von O₂-Konzentration, CO-Konzentration und NO_x-Konzentration am Einlass des Ofenstrangs [Boden03.01]

Eine weitere Größe, die nur ungenau bekannt ist, ist der Gasvolumenstrom durch das Drehrohr. Während des Messbetriebs wurden an verschiedenen Stellen der Anlage Gasvolumenströme mit Prandtl- und Pitot-Rohren bestimmt. Anschließend wurden die Gasvolumenströme auf verschiedenen Wegen bilanziert, wobei sich Bilanzdifferenzen von bis zu -17 % ergaben. Ursache für diese Abweichung können neben Messfehlern u. a. Falschluffeinbrüche im Kühler und an den Ofendichtungen sein [Boden03.01]. Zur genaueren Bestimmung des Drehrohr-Volumenstroms wurde daher im Rahmen der genannten Arbeit eine Verbrennungsrechnung für das Drehrohr durchgeführt. Mit dieser wurde der erforderliche Sekundärluft-Volumenstrom (einschließlich Falschluff) berechnet, bei dem sich der gemessene O₂-Gehalt im Rauchgas einstellt. Während der gemessene Sekundärluft-Volumenstrom bei 19.841 m³/h i. N. lag, betrug der berechnete mit 38.200 m³/h i. N. erheblich mehr (Abbildung 4-15). Mögliche Ursachen für diese Differenz sind:

- Messungenauigkeiten der Prandtl- und Pitot-Rohre (+/-10%),
- Verstopfen der Messrohre durch den Ofenstaub,
- Messfehler bei der Temperaturbestimmung, die in die Volumenstrombilanz einfließen, da der mit den Prandtl- und Pitot-Rohren ermittelte Volumenstrom im Betriebszustand erfasst wird und in den Normzustand umgerechnet werden muss,
- Strahlenbildung im Calcinatorfuß, die die Messung von Strömungsgeschwindigkeiten, Spezieskonzentrationen und Temperaturen beeinträchtigt,
- schwankende Zusammensetzung des Drehrohrrauchgases infolge der stark variierenden Zusammensetzung des verwendeten Sekundärbrennstoffs im Drehrohrfen,
- ungenaue Bestimmung der Brennstoffzusammensetzung als Folge einer möglicherweise fehlerhaften Probennahme,
- Messung der einzelnen Größen zu unterschiedlichen Zeitpunkten.

Zur Bestimmung der Randbedingungen für die CFD-Simulation wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit eine eigene Verbrennungsrechnung für das Drehrohr durchgeführt und hierbei der Sekundärluft-Volumenstrom (einschließlich Falschluff) so lange variiert, bis gemessener und berechneter O₂-Gehalt annähernd übereinstimmen. Der so ermittelte Sekundärluft-Volumenstrom lag mit 40.000 m³/h i. N. recht nah an dem Wert, der während der Versuche [Boden03.01] berechnet worden war (38.200 m³/h i. N.).

Allerdings zeigte sich, dass allein durch Variation der Falschluffmenge die berechneten O₂- und CO₂-Gehalte des Drehrohr-Rauchgases nicht gleichzeitig in Übereinstimmung mit den Messwerten gebracht werden können. Für den Sekundärluftstrom von 40.000 m³/h i. N. ergibt sich zwar rechnerisch der gemessene O₂-Gehalt, jedoch weicht dabei der rechnerische CO₂-Gehalt von 16,6 % (bei Zählung des CO als CO₂) vom gemessenen Wert um ca. 17 % ab (Abbildung 4-16).

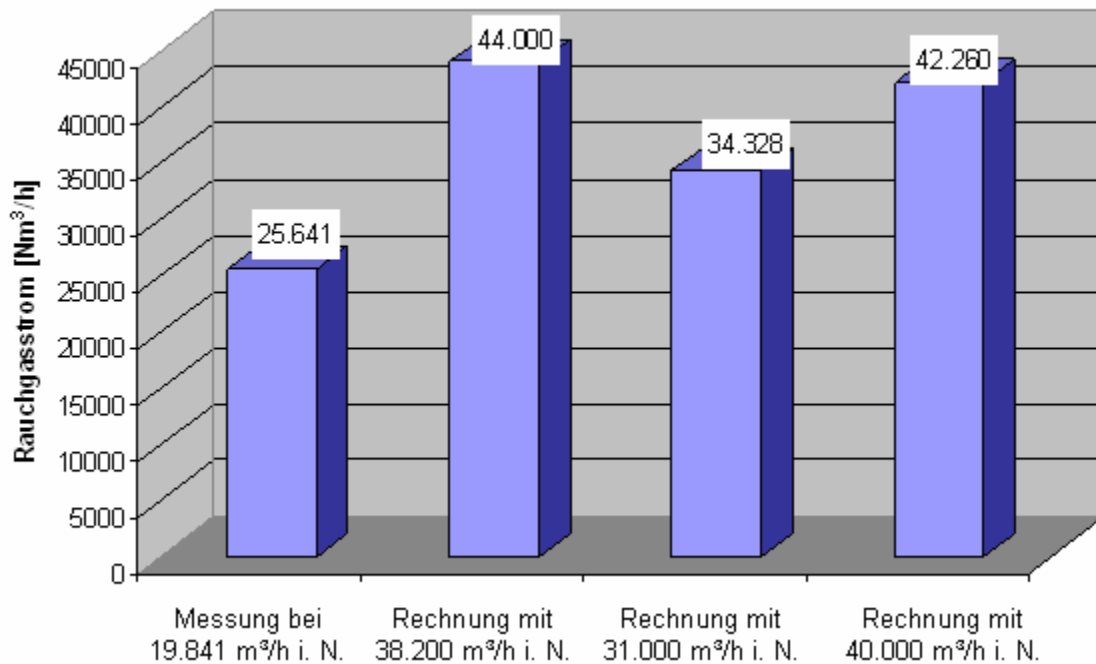


Abbildung 4-15: Einfluss der Sekundärluft-Menge auf den Volumenstrom des Drehrohrabgases

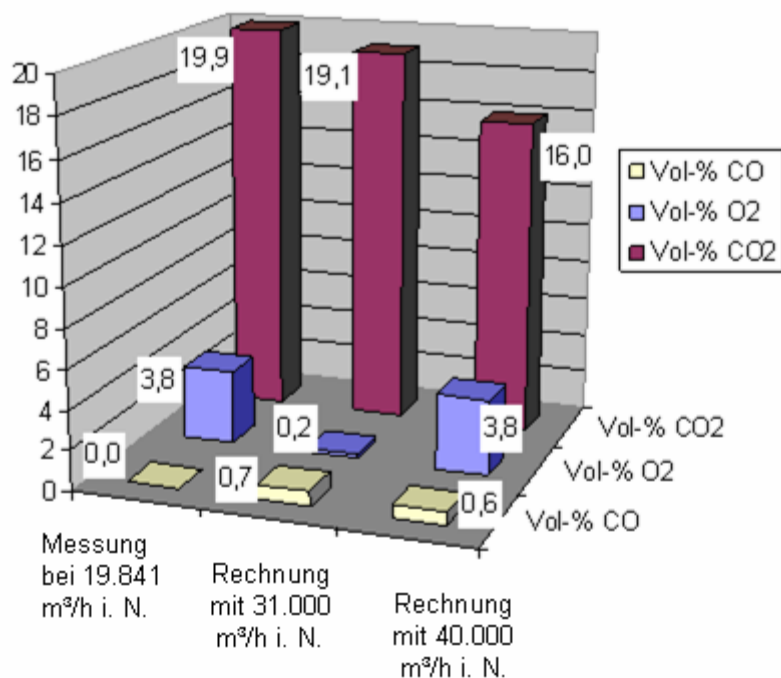


Abbildung 4-16: Einfluss der Sekundärluft-Menge auf die Zusammensetzung des Drehrohrabgases

Bei Messungen an einer zweiten Anlage wurde ebenfalls festgestellt, dass die Bilanzdifferenz bei einer Rechnung über die Sauerstoffkonzentration erheblich geringer war als bei einer Rechnung über die gemessenen Volumenströme. Auch hier überstieg der aus den Sauerstoff-Konzentrationen ermittelte Sekundärluft-Volumenstrom deutlich den über die Strömungsgeschwindigkeiten berechneten [Boden03.02]. Es lässt sich daher nicht ausschließen, dass am Calcinator bei der Volumenstrom-Bestimmung die angeführten unvermeidlichen Messfehler sich unter

Umständen ungünstig kombinieren und fortpflanzen, so dass der hiermit berechnete Sekundärluft-Volumenstrom zu gering ist.

Da die Sauerstoffkonzentration im Hinblick auf Wärmefreisetzung, Brennstoffausbrand und NO_x -Abbau wichtiger als die CO_2 -Konzentration ist, wurde für die CFD-Simulationen ein Sekundärluft-Strom (einschließlich Falschluff) von $40.000 \text{ m}^3/\text{h}$ i. N. nach der Verbrennungsrechnung angenommen, so dass den Rechnungen die gemessene Sauerstoffkonzentration (3,8 Vol.-%) zugrunde liegt. Die sich hierbei ergebende Abweichung beim CO_2 -Anteil kann unter den geschilderten Umständen akzeptiert werden.

Für den Tertiärluftstrang sind die Randbedingungen genauer bestimmbar, da dieser mit einem Teil der heißen Abluft aus dem Klinkerkühler (Tertiärluft) und nicht mit Drehrohrabgasen beaufschlagt wird. Daher besteht er zu 22 Vol.-% aus O_2 , zu 77 Vol.-% aus N_2 und 1 Vol.-% aus H_2O . Unsicher ist hier lediglich der Volumenstrom.

Der Wärmestrom über die Calcinatorwände ist hauptsächlich von der Wärmeleitung durch Ausmauerung, Isolation und Stahlmantel bestimmt. Da hierfür die Geometrie- und Stoffdaten vorlagen, konnte der entsprechende Wärmedurchgangskoeffizient bestimmt werden. Die Isolationswirkung der Ansatzschicht im Calcinator wurde ebenfalls rechnerisch berücksichtigt, allerdings ist diese gegenüber der Isolation nicht relevant. Für die Außenwandungen des größtenteils eingehausten Calcinators wurde freie Konvektion angenommen. Eine Sensitivitätsanalyse zum Wärmedurchgang durch die Calcinatorwände zeigte im Rahmen sinnvoller Wertebereiche der Einflussgrößen keine nennenswerte Empfindlichkeit.

Die erforderlichen Daten zu Kohle und Kalkmehl (Korngrößenverteilung, elementare Zusammensetzung) standen zur Verfügung.

Die Zusammensetzung der Kohleflüchtigen ergab sich dabei aus der Zusammensetzung der eingesetzten Kohle (Tabelle 4-2 und Tabelle 4-3).

C [Ma-%]	H [Ma-%]	N [Ma-%]	O [Ma-%]	S [Ma-%]	Asche [Ma-%]	Feuchte [Ma-%]
73,1	4,2	1,2	5,5	0,6	14,1	1,2

Tabelle 4-2: Zusammensetzung der verwendeten Kohle

Asche [Ma-%]	Feuchte [Ma-%]	Flüchtige [Ma-%]	Koks [Ma-%]	H_u [kJ/kg Brennstoff feucht]
14,1	1,2	29,0	55,7	28.500

Tabelle 4-3: Kurzanalyse der verwendeten Kohle

Aus der Massenzusammensetzung der Kohle ergab sich dabei die Zusammensetzung der generischen Komponente "Kohleflüchtige" zu $\text{C}_{14,7}\text{H}_{42,4}\text{O}_{3,48}\text{S}_{0,177}$ (Tabelle 4-4).

C [mol C/mol Flüchtige]	H [mol H/mol Flüchtige]	O [mol O/mol Flüchtige]	S [mol S/mol Flüchtige]
14,7	42,4	3,48	0,177

Tabelle 4-4: Molare Zusammensetzung der Kohleflüchtigen

Eine Vereinfachung musste im Bereich der Mehleinträge vorgenommen werden. An der Realanlage erfolgt die Gutaufgabe in den Calcinator über Rutschen, die in das Calcinatorinnere hineinragen. Ob das Aufgabegut bereits auf der Rutsche aufgewirbelt und sofort von der Gasströmung aufwärts getragen wird, oder als Strähne zunächst in den Calcinatorfuß fällt, ist nicht bekannt. Bei den Simulationen wurde davon ausgegangen, dass keine Strähnenbildung auftritt. Die Partikelbahnen beginnen daher im Bereich der Mehleinträge, die Partikel werden sofort von der aufwärts gerichteten Gasströmung erfasst. Wegen dieser vereinfachenden Annahme stimmt die berechnete Ausbildung der von den Kalkmehl-Partikeln verursachten CO₂-reichen Strähnen in den beiden Strängen nicht unbedingt mit der gemessenen Lage der CO₂-Strähnen überein.

4.4 CFD-Simulation des Gesamtprozesses

4.4.1 Referenzfall

Die Berechnung des Referenzfalls erfolgte mit folgenden Modellen:

- Turbulenz: Standard-k-ε-Modell (Modellierung der turbulenten Viskosität mit der Prandtl-Kolmogorov-Beziehung, Abschnitt 3.5.2)
- Strahlung: wsgg-Modell ohne Berücksichtigung der Partikel (vgl. Abschnitt 2.4.2),
- Reaktionsmodell: Zweischnitt-Schema mit dem Eddy-Dissipation-Modell (vgl. Abschnitt 2.5.1.1. und 2.5.2.2).

Grund für die Wahl dieser Modelle ist, dass sie bei der CFD-Simulation von Prozessen der Energie- und Verfahrenstechnik etabliert und numerisch robust sind, einen verhältnismäßig moderaten Ressourcenbedarf haben und eine für erste Berechnungen hinreichende Genauigkeit aufweisen. Die Kombination dieser Modelle stellt den einfachsten Berechnungsfall dar, der sinnvolle Ergebnisse erwarten lässt. Durch Austausch einzelner Submodelle durch detailliertere kann die Simulation gezielt verbessert werden.

Die Beschreibung der Calcinierung und Sulfatierung der Kalkmehlpartikel erfolgte bei allen Rechnungen mit dem Vonderbank-Modell, die Beschreibung der Versinterung mit dem Modell von Silcox (vgl. Abschnitt 4.1.3).

Abbildung 4-17 verdeutlicht die Abmessungen des Calcinators. Gezeigt wird der Verlauf der Höhenkoordinate y in einer Schnittebene $x = \text{const.}$ Zur besseren Orientierung sind zusätzlich einige Kanten der Anlage eingetragen (Ofenstrang, Teile des Tertiärluftstrangs, Ein- und Auslauf der Zyklonmischkammer). Der Tertiärlufteinlass befindet sich auf dem Niveau -7 m, der Drehrohreinlass auf -1 m. Die Oberkante der Mischkammer befindet sich auf 44 m.

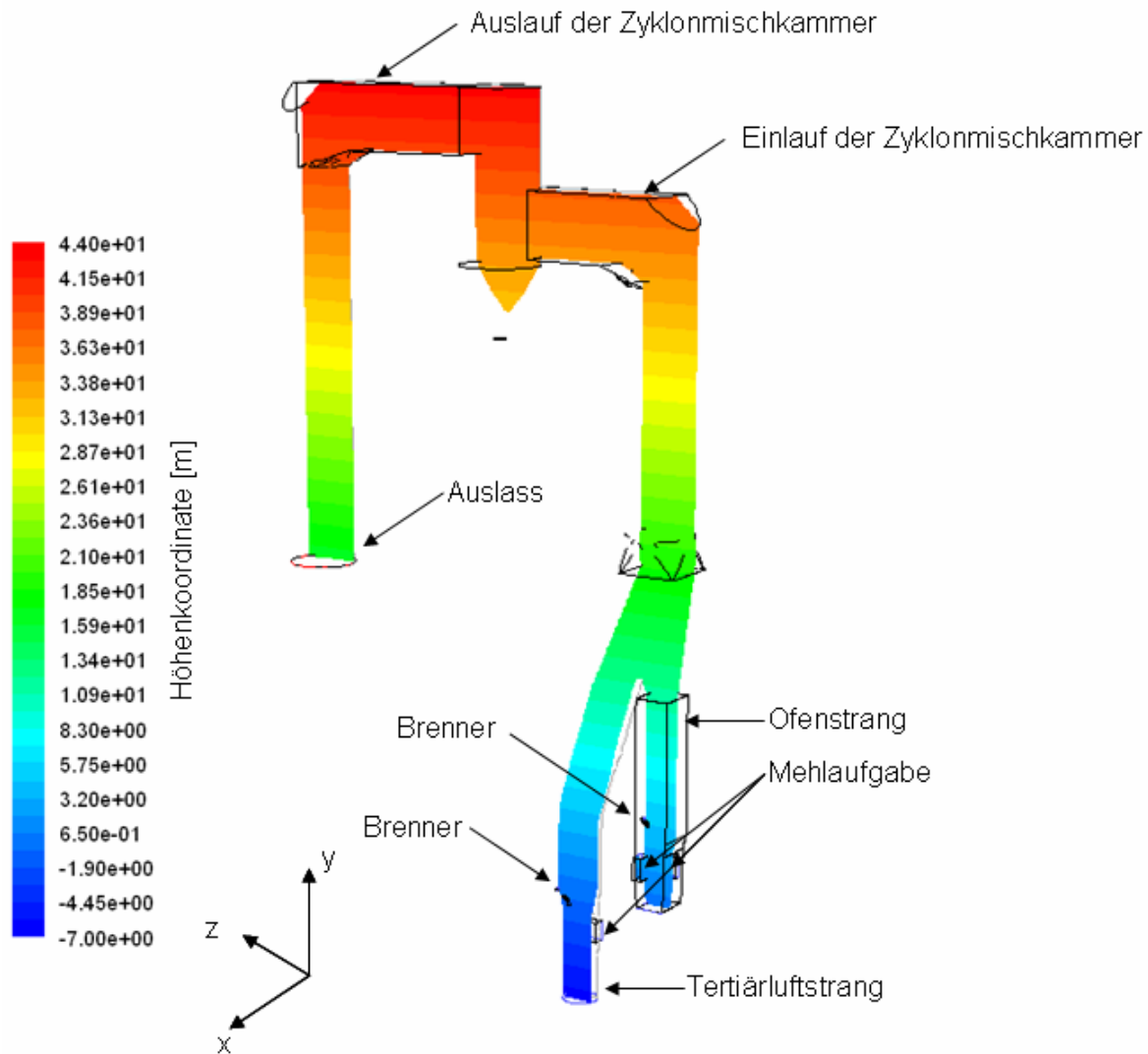


Abbildung 4-17: Höhenabmessungen des Vorcalcinator

In Abbildung 4-18 ist der Temperaturverlauf in zwei Schnittebenen $z = \text{const.}$ des Calcinator dargestellt. Diese Ebenen verlaufen durch die Brennerachsen. Die Abbildung zeigt, wie das ca. $1050\text{ }^\circ\text{C}$ heiße Drehrohrabgas und die ca. $900\text{ }^\circ\text{C}$ heiße Tertiärluft in den Calcinator eintreten. Nach Zugabe des Rohmehls beginnt der Calciniervorgang, wodurch die Temperatur rasch auf 780 bis $850\text{ }^\circ\text{C}$ sinkt. In der Umgebung der Brennermündungen steigt die Temperatur auf maximal $1100\text{ }^\circ\text{C}$ an. Die durch den Brennstoffabbrand freigesetzte Energie wird von der Calcinierungsreaktion sehr rasch aufgebraucht, so dass schon kurz oberhalb der Brenner die Prozesstemperatur wieder auf ca. $900\text{ }^\circ\text{C}$ abgesunken ist. Im weiteren Verlauf des Prozesses sinkt die Temperatur langsam ab, am Calcinatoraustritt beträgt sie noch ca. $810\text{ }^\circ\text{C}$ (Abbildung 4-19).

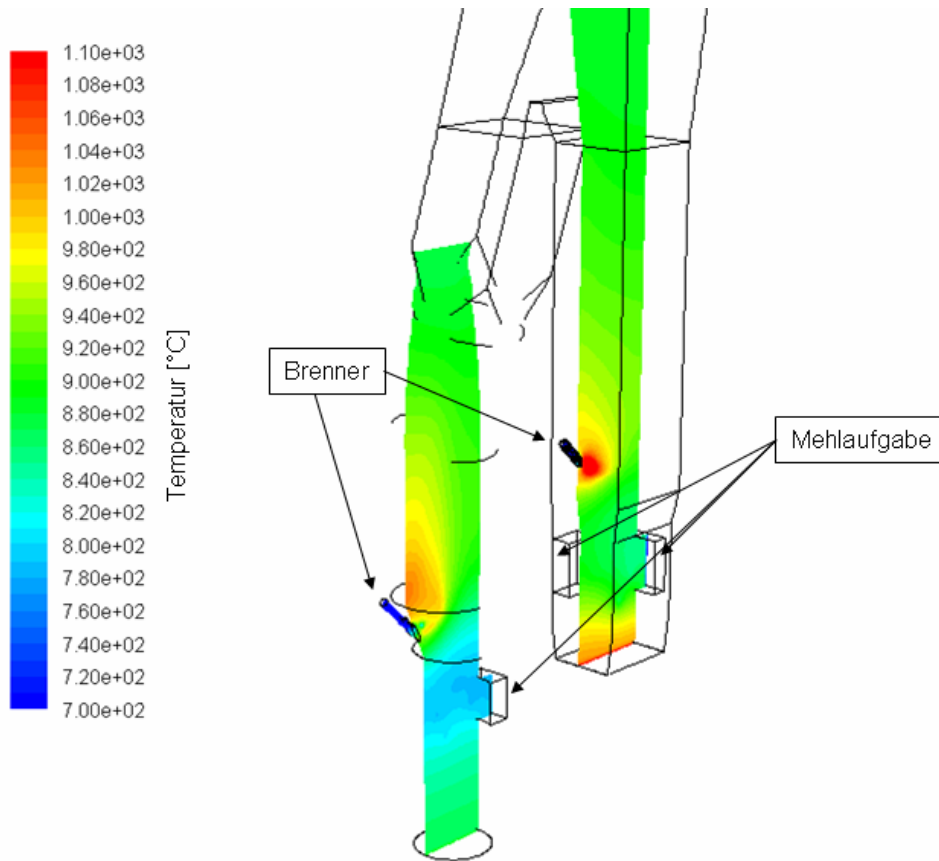


Abbildung 4-18: Temperaturverteilung in zwei Schnittebenen $z = \text{const.}$ (Brennerebenen)

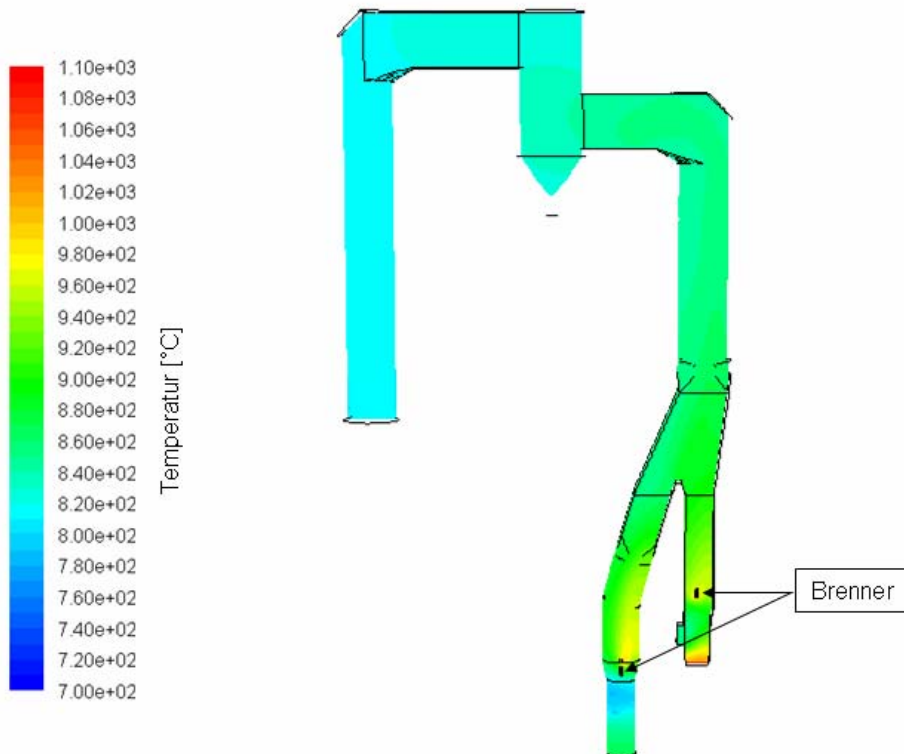


Abbildung 4-19: Temperaturverteilung im Calcinator; Schnitt $x = \text{const.}$

In Abbildung 4-20 ist die Verteilung der flüchtigen Bestandteile der Kohle in zwei Ebenen $z = \text{const.}$ (Brennerebenen wie in Abbildung 4-18) dargestellt. Die genaue Untersuchung der Strömungsquerschnitte oberhalb der Brenner zeigte, dass im Ofenstrang die Flüchtigen gleichmäßig über den gesamten Strömungsquerschnitt verteilt auftreten, während sich im Tertiärluftstrang oberhalb der Brennermündung eine deutliche, aufwärts gerichtete Strähne ausbildet. Dies ist auf die unterschiedliche Ausprägung der Partikelbahnen in den beiden Strängen zurückzuführen. Im Tertiärluftstrang werden die Partikel von der aufwärts gerichteten Strömung sehr rasch erfasst, so dass eine horizontale Dispersion nur bedingt stattfindet. Im Drehrohrstrang dagegen verteilen sich die Brennstoffpartikel gleichmäßig über den gesamten Querschnitt (Abbildung 4-20). Ursache hierfür sind die stark unterschiedlichen Geschwindigkeiten der Primärluft in den beiden Brennern, mit der die Partikel in horizontaler Richtung gefördert werden (Tertiärluftstrang: 15 m/s, Ofenstrang: 41 m/s).

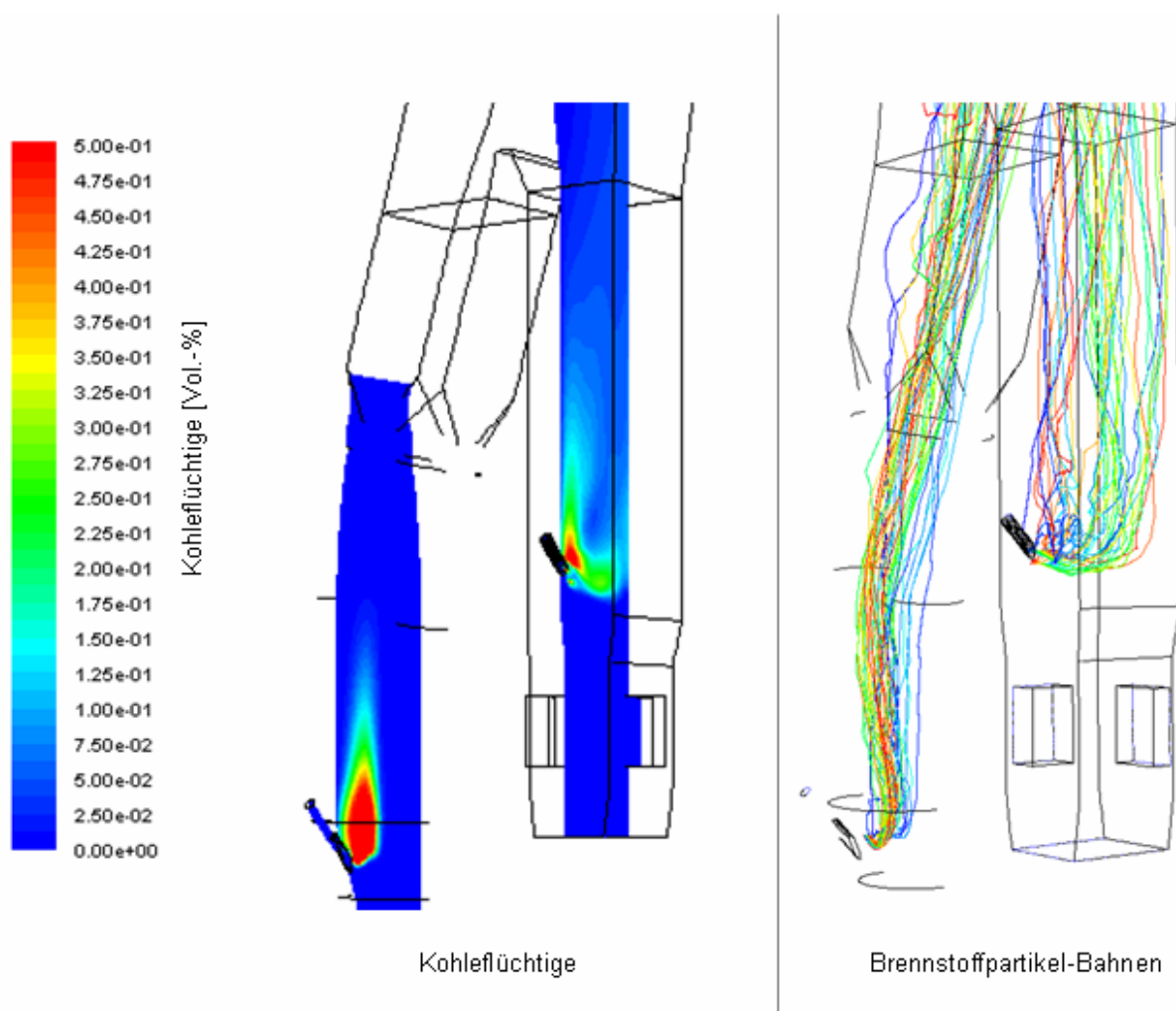


Abbildung 4-20: Verteilung der flüchtigen Bestandteile und Bahnen der Brennstoffpartikel

Die Ausbildung einer Strähne aus flüchtigen Kohlebestandteilen im Tertiärluftstrang bewirkt dort die Bildung einer zweiten Strähne aus dem Zwischenprodukt CO. Trotz des globalen Sauerstoff-Überschusses im Tertiärluftstrang herrscht in diesem Bereich ein lokaler Sauerstoffmangel (Abbildung 4-21).

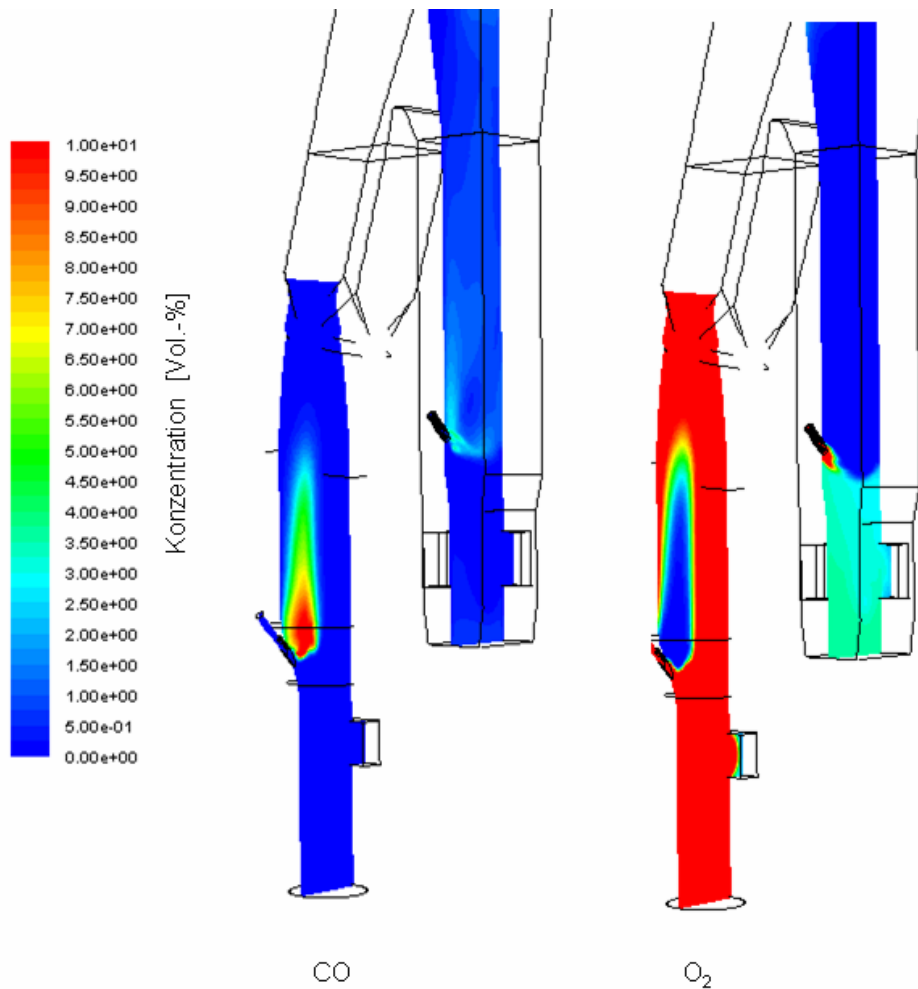


Abbildung 4-21: Konzentrationen von CO und O₂ in den Brennebenen

Die unterschiedliche Ausbildung der CO-Verteilung in den beiden Strängen des Calcinators wird in Abbildung 4-22 weiter verdeutlicht. Dort ist die CO-Konzentration in 3 verschiedenen Ebenen $x = \text{const.}$ (vgl. Abbildung 4-23) dargestellt. Die Strähne im Tertiärluftstrang befindet sich nur auf der Calcinator-Vorderseite und verschwindet relativ rasch, während die CO-reiche Zone im Ofenstrang sich bis zur Rückwand fortsetzt.

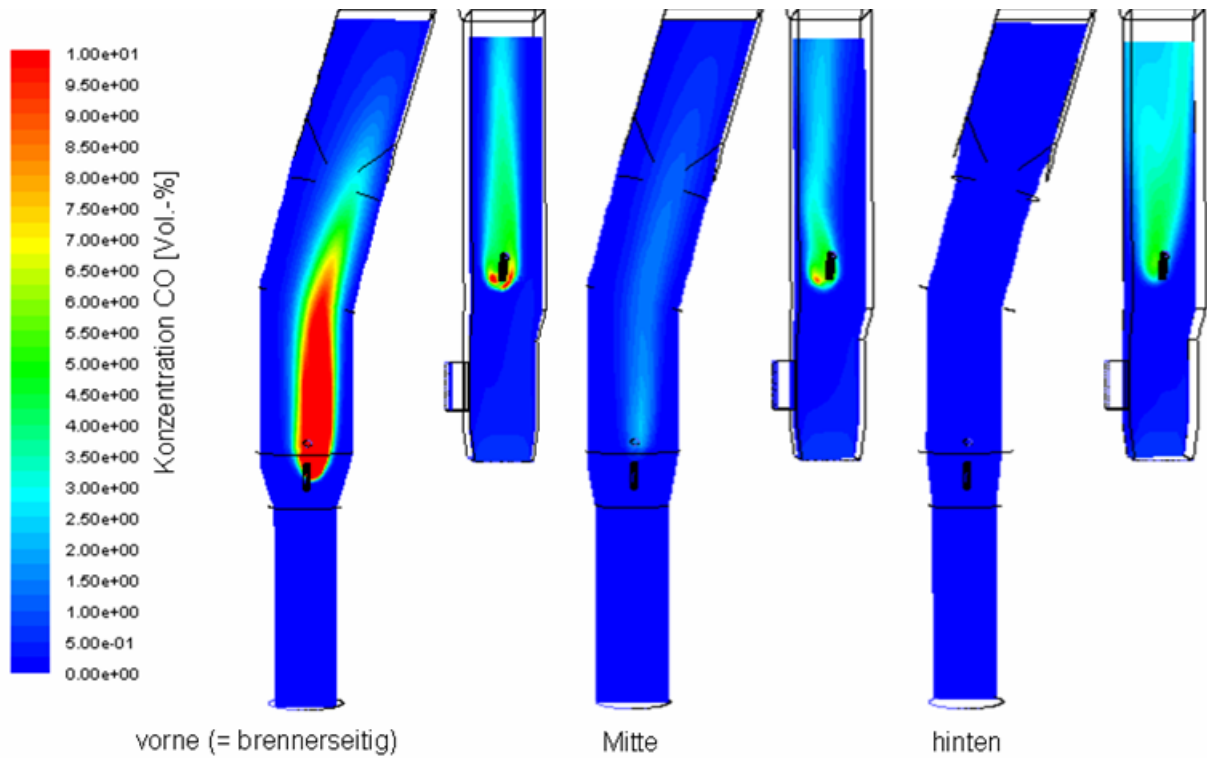


Abbildung 4-22: Ausdehnung der CO-Ströme in den beiden Calcinatorsträngen

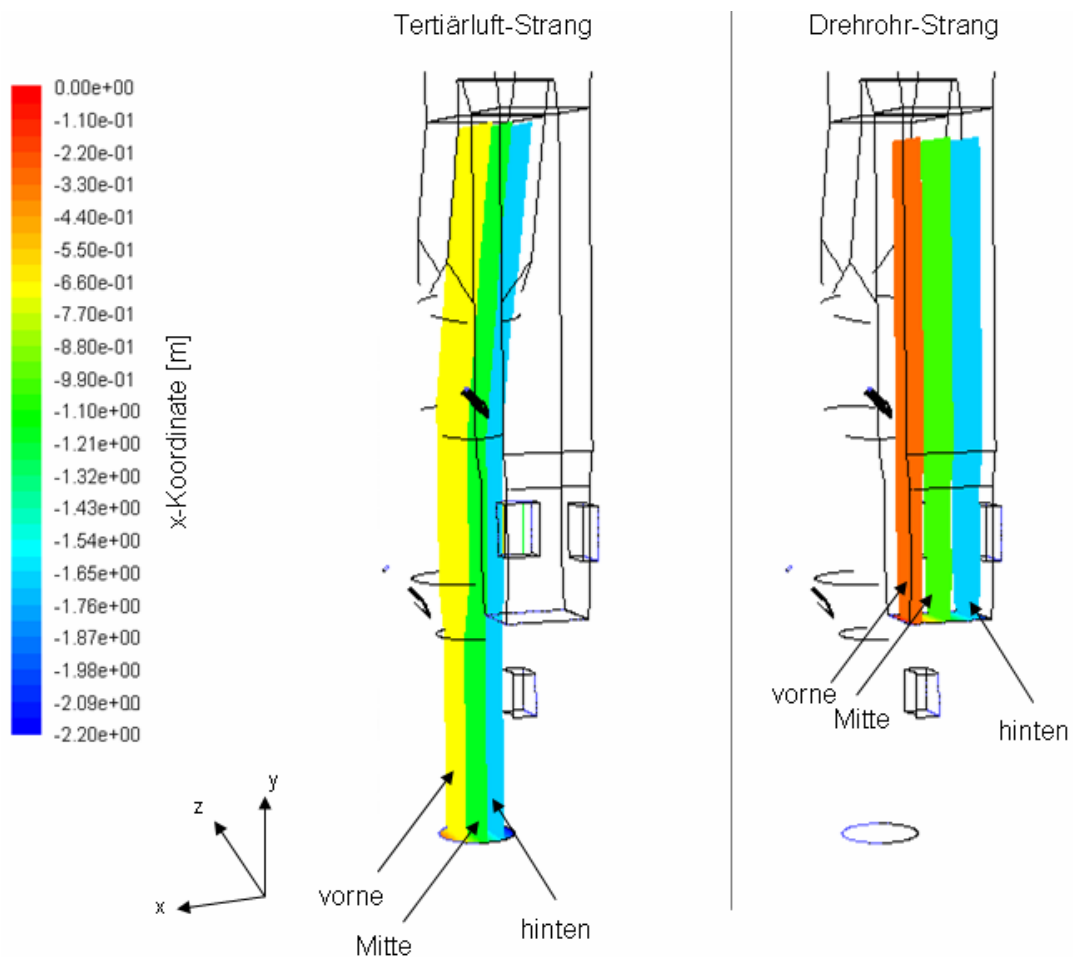


Abbildung 4-23: Darstellung verschiedener Ebenen $x = \text{const.}$ im Calcinator

Die Strömungsgeschwindigkeiten in den Brennebenen sind in Abbildung 4-24 dargestellt. Die Lanze des Ofenstrang-Brenners reicht aufgrund ihrer hohen Horizontalgeschwindigkeit bis zur gegenüberliegenden Wand, während die Lanze der Brenners im Tertiärluftstrang wegen ihrer geringeren Horizontalgeschwindigkeit rasch nach oben abgelenkt wird. Im Bereich der Mehleinträge wird die Gasphase verzögert, da sie die dort aufgegebenen Partikel beschleunigt. Dort und im Bereich der Brennermündungen bewirken die großen Geschwindigkeitsgradienten eine erhöhte Turbulenzproduktion. In Abbildung 4-25 ist die kinetische Turbulenzenergie in den Brennebenen dargestellt. Während der linke Teil der Abbildung den Fall der partikellosen Gasströmung zeigt (Beaufschlagung des Calcinator lediglich mit Primärluft, Tertiärluft und Drehrohrabgasen, keine Kohle- oder Kalkmehlzugabe), ist rechts der normale Calcinatorbetrieb (mit Kohle- und Kalkmehlbeaufschlagung) dargestellt. Die höchste Turbulenz herrscht jeweils im Bereich der größten Geschwindigkeitsgradienten.

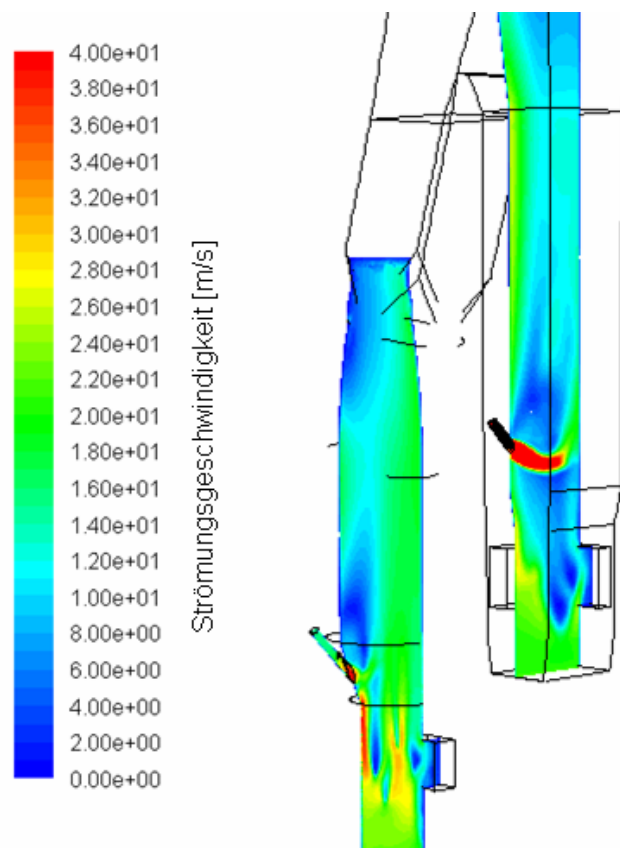


Abbildung 4-24: Strömungsgeschwindigkeiten in den Brennebenen

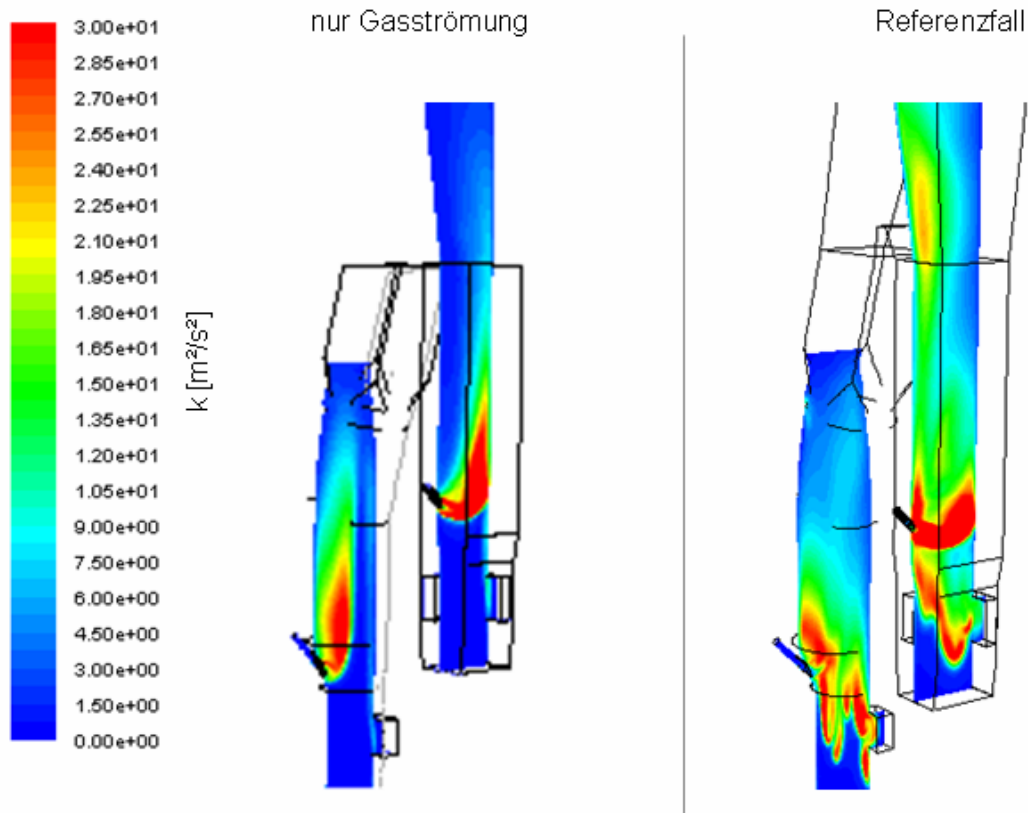


Abbildung 4-25: Kinetische Turbulenzenergie in den Brennerebenen

Die Brennerlanzen sind daher die Hauptquelle für die Turbulenz im Calcinator. Die durch die Feststoffaufgabe erzeugten Gradienten der Gasphasengeschwindigkeit und die durch den Verbrennungsvorgang hervorgerufenen Temperatur-, Dichte- und Volumenänderungen der Gasphase stellen zwar eine zusätzliche Turbulenzquelle dar, bewirken jedoch keine grundsätzliche Änderung der Turbulenzverhältnisse.

Die Turbulenz verstärkt die Durchmischung des Gemischs aus flüchtigen Kohlebestandteilen, CO und Luft. In Abbildung 4-26 ist der Quotient ε/k dargestellt, der nach dem Eddy-Dissipation-Modell (vgl. Abschnitt 2.5.2.2) ein Maß für die Geschwindigkeit der Vermischung ist. Diese Vermischungsgeschwindigkeit ist in der Umgebung der Brennerlanzen am höchsten, gefolgt vom Bereich der Mehleinträge.

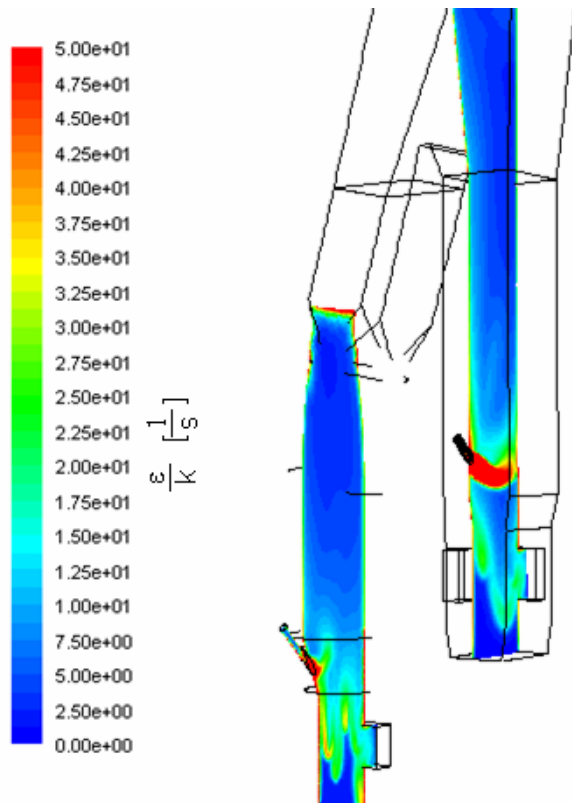


Abbildung 4-26: Vermischungsgeschwindigkeit in den Brennerebenen

Abbildung 4-27 zeigt die Bahnen mehrerer Kalkmehlpartikel durch den Calcinator. Die Bahnen sind dabei nach dem Calciniierungsgrad der Partikel eingefärbt. Dieser ist definiert als:

$$C_c = \frac{n_{CaO} + n_{CaSO_4}}{n_{CaCO_3} + n_{CaO} + n_{CaSO_4}} \quad \text{Gleichung 4-21}$$

mit

- n_{CaO} : Stoffmenge an Calciumoxid im Partikel [mol]
- n_{CaCO_3} : Stoffmenge an Calciumcarbonat im Partikel [mol]
- n_{CaSO_4} : Stoffmenge an Calciumsulfat im Partikel [mol]

Bei dieser Definition des Calciniierungsgrades wird auch das in Sulfatform vorliegende Calcium als calciniert betrachtet und so die unerwünschte Reaktion des Calciumoxids zu Calciumsulfat (Gleichung 4-4) berücksichtigt. Die Abbildung zeigt, wie die Partikel mit einem Calciniierungsgrad von ca. 15 % in den Calcinator eintreten. Während die kleinen Partikel (10 μm bis 80 μm) vollständig calciniert werden, erreichen die großen (300 bis 500 μm) nur einen Calciniierungsgrad von etwa 60 bis 70 %.

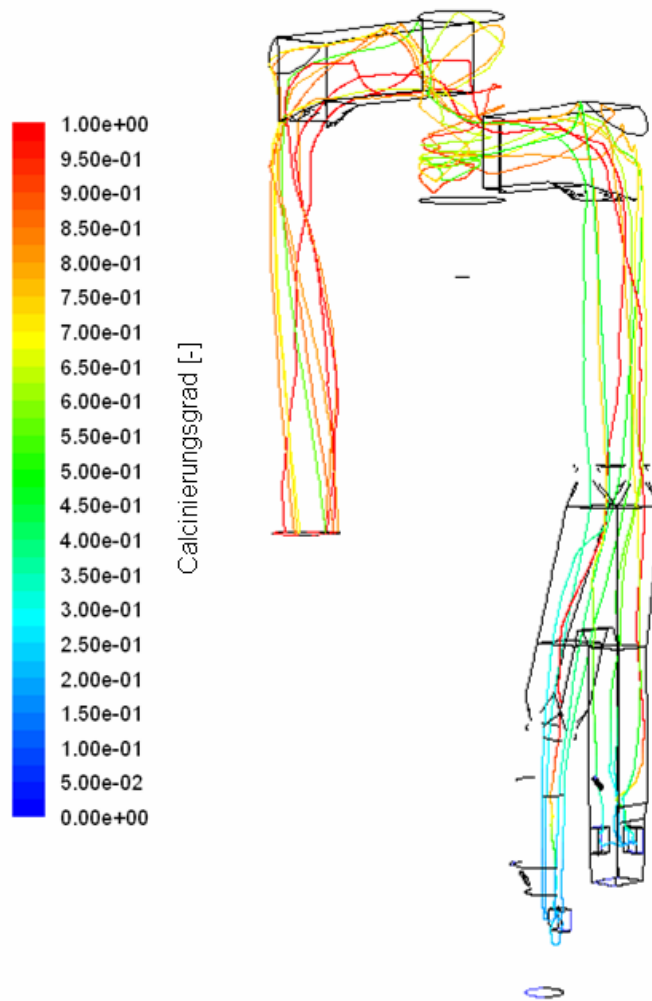


Abbildung 4-27: Verlauf des Calciniierungsgrades einzelner Kalkmehlpartikel auf ihrem Weg durch den Calcinator

4.4.2 Messwerte

Die Lage der Messebenen ist in Abbildung 4-28 dargestellt. Die Lage der einzelnen Messpunkte in den Ebenen und die an den Punkten gemessenen Werte sind in Abbildung 4-29 bis Abbildung 4-32 dargestellt. Innerhalb der Stränge tritt nur eine leichte, regional begrenzte Strähnenbildung auf, die u. a. von den Bahnen der individuellen Partikel hervorgerufen wird. Wegen der diskutierten Unsicherheit bzgl. des Anfangspunktes der Kalkmehlpartikel-Bahnen und der stochastischen Natur des Discrete-Random-Walk-Modells, dem die Partikelbahn-Berechnung zugrunde liegt (vgl. Abschnitt 2.3.2), haben diese mikroskopischen Strähnen keine Bedeutung für die Simulation.

Dagegen bewirkt die Zusammenführung der beiden Stränge die Ausbildung einer örtlich ausgedehnten, makroskopischen Strähne in der Vormischzone, deren Verlauf mit CFD-Methoden abgebildet werden kann.

Für die Temperaturen waren lediglich flächenquerschnitts-gemittelte Werte zu betrachten, da keine nennenswerte Ausbildung von Temperatursträhnen bei den Messungen festgestellt wurde (Tabelle 4-5).

Bei den Messungen der Spezieskonzentrationen konnte an den einzelnen Messpunkten nur über einen verhältnismäßig kurzen Zeitraum gemessen werden. Diese Werte sollten daher mit Vorsicht betrachtet und nur als Trendwerte, nicht als absolute Werte angesehen werden [Boden03.01].

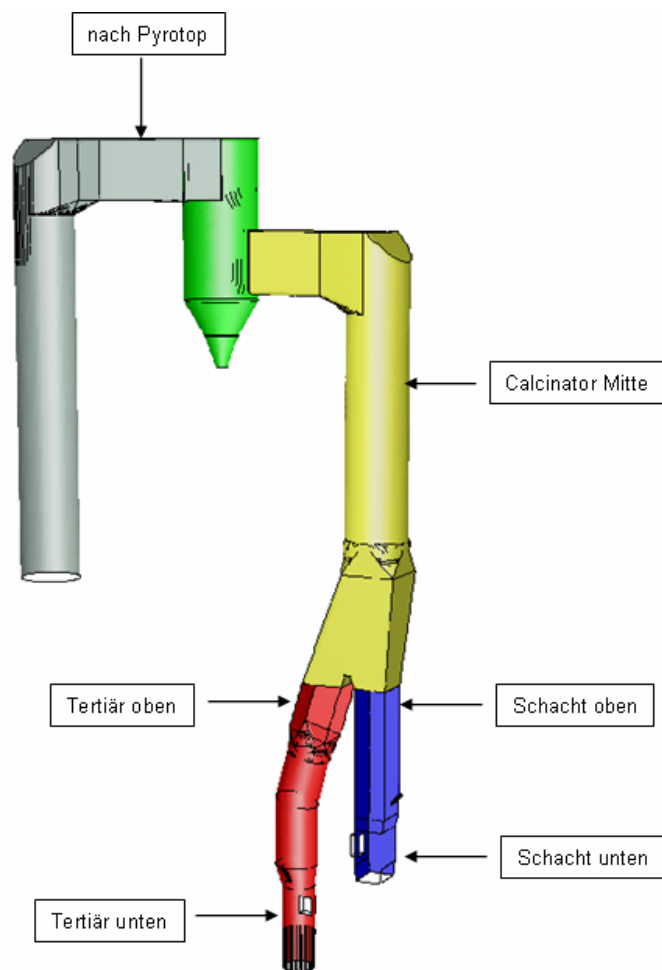


Abbildung 4-28: Lage der Messebenen im Calcinator

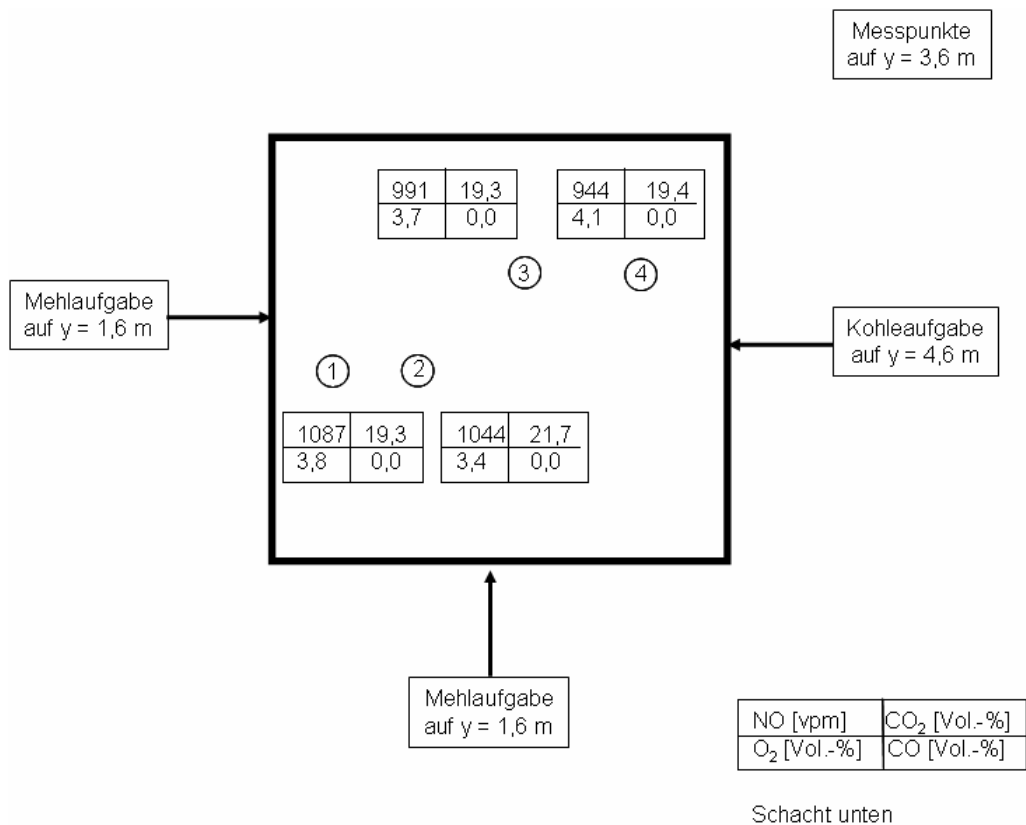


Abbildung 4-29: Messpunkte in der Messebene "Schacht unten"

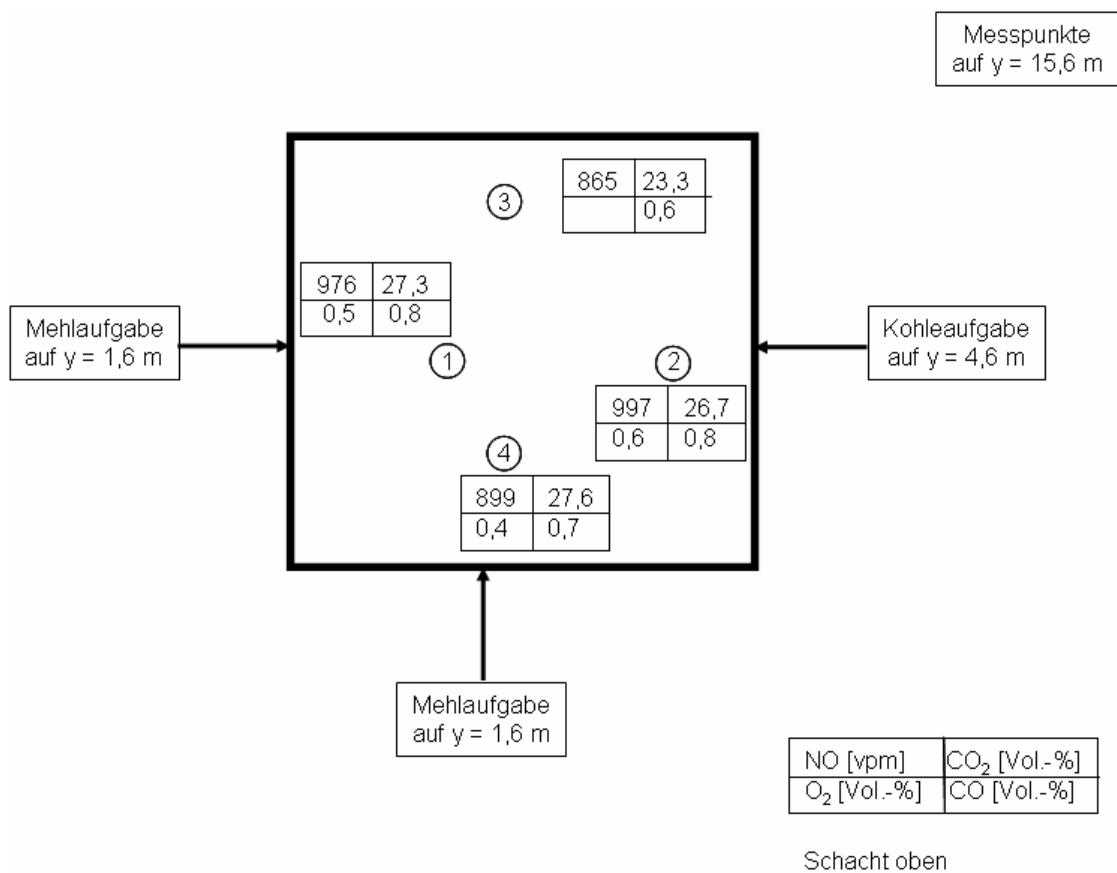


Abbildung 4-30: Messpunkte in der Messebene "Schacht oben"

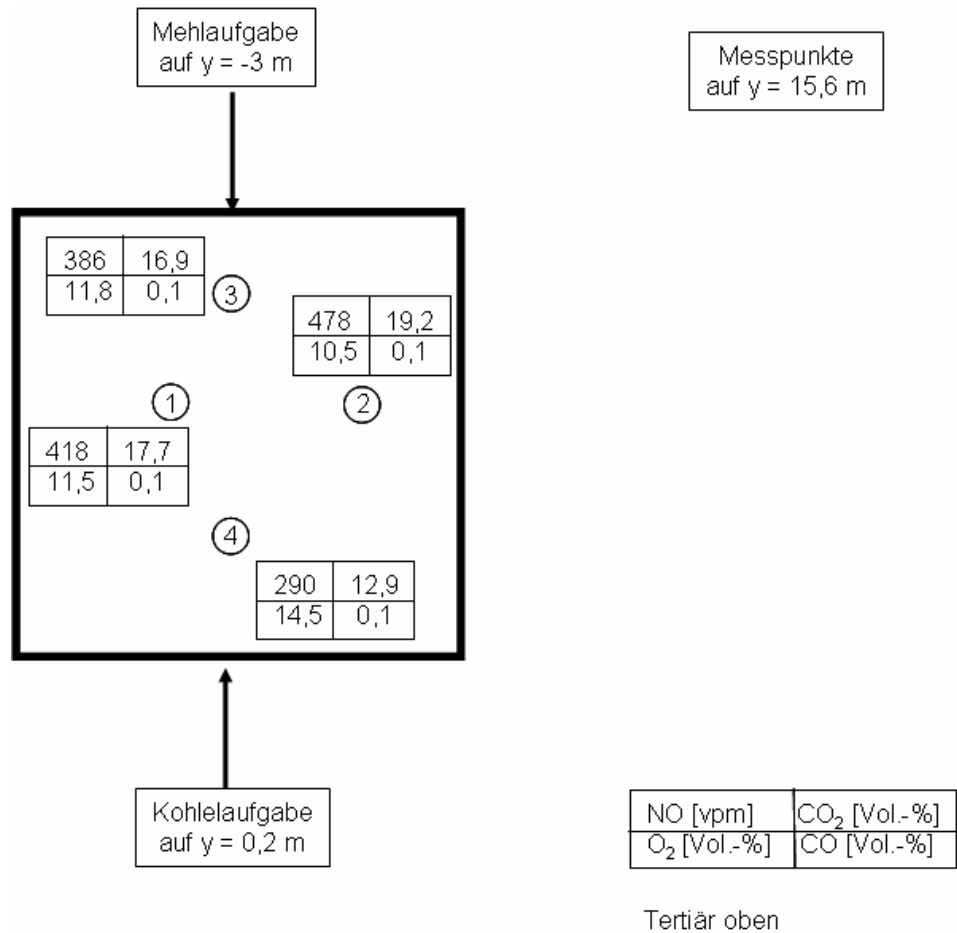


Abbildung 4-31: Messpunkte in der Messebene "Tertiär oben"

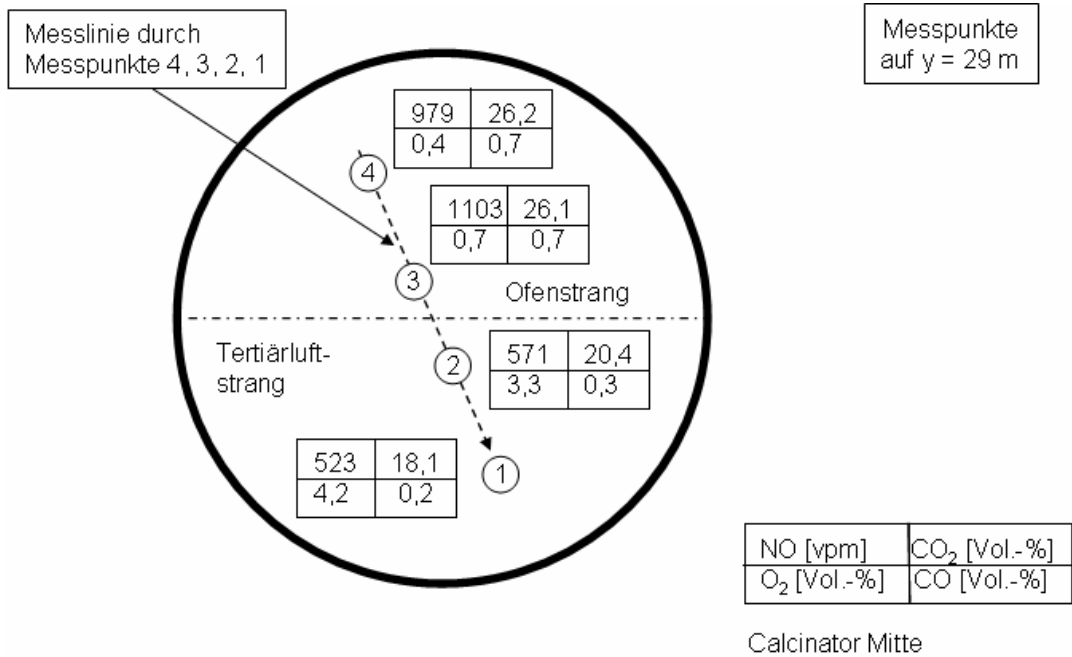


Abbildung 4-32: Messpunkte in der Ebene "Calcinator Mitte"

Messstelle	mittlere Temperatur [°C]
"Schacht unten"	844
"Schacht oben"	855
"Tertiär unten"	-
"Tertiär oben"	877
"Calcinator Mitte"	861
"nach Pyrotop"	833

Tabelle 4-5: Gemessene Temperaturen in den Messebenen

4.4.3 Beurteilung des Referenzfalles

In Abbildung 4-33 sind gemessene und berechnete querschnittsgemittelte Temperaturen gegenübergestellt.

Die Berechnung der Strahlungsstoffwerte erfolgte beim Referenzfall mit dem wsgg-Modell (vgl. Abschnitt 2.4.2). Eine weitere Rechnung wurde mit dem Neubronner-Modell (vgl. Abschnitt 4.1.5) zur Bestimmung der Strahlungsstoffwerte vorgenommen. Zusätzlich wurde eine auf dem Referenzfall basierende Rechnung durchgeführt, bei der die Calciniertgeschwindigkeit erhöht war. Diese Beschleunigung wurde durch Limitierung des Widerstands der Calciniertreaktion, R_1 , (vgl. Kapitel 4.1.3), auf einen maximalen Wert von 20 s/m bewerkstelligt. Im Normalfall hat R_1 einen Wert von ca. 60 s/m.

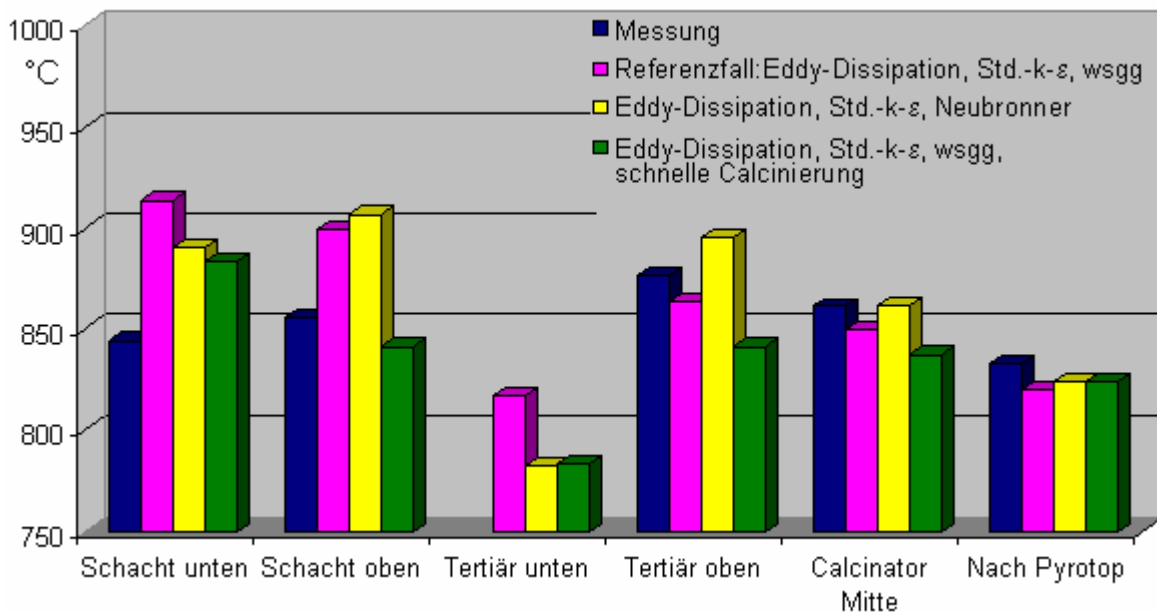


Abbildung 4-33: Temperaturen in den Messebenen

Im Drehrohrstrang (Messstellen "Schacht unten" und "Schacht oben") treten bei allen Rechnungen größere Abweichungen auf. Sowohl beim Referenzfall als auch beim Neubronner-Modell sind die berechneten Temperaturen zu hoch. Entweder wird im Drehrohrstrang die im Brennstoff gebundene Energie zu rasch freigesetzt (d. h. der Abbrand der Kohleflüchtigen, Schema 4-2 erfolgt zu schnell), oder die endotherme Calciniertung erfolgt zu langsam bzw. zu spät. Daher wurde eine weitere, auf dem Referenzfall basierende Rechnung durchgeführt, bei der der Abbrand der Kohleflüchtigen mit reduzierter Geschwindigkeit erfolgte. Dies wurde durch Verkleinerung der Modellkonstanten A des Eddy-Dissipation-Modells (vgl. Abschnitt

2.5.2.2) erreicht. Die so berechneten Temperaturen entsprachen jedoch denen des Referenzfalls, eine zu rasche Freisetzung der Brennstoffenergie ist daher anscheinend nicht die alleinige Ursache für die zu hohen berechneten Temperaturen im Ofenstrang.

Dagegen senkt die Beschleunigung der Calcinierungsreaktion durch Begrenzung des Reaktionswiderstands R_1 auf 20 s/m die Temperatur an der Messstelle "Schacht unten" leicht und an der Stelle "Schacht oben" deutlich, dort allerdings schon unter den Messwert. Die vorgenommene Begrenzung des Reaktionswiderstandes bedeutet jedoch eine Steigerung der Calcinierungsgeschwindigkeit um etwa den Faktor zwei gegenüber den experimentell ermittelten Werten, denen das Vonderbank-Modell zugrunde liegt. Es erscheint daher nicht unbedingt plausibel, dass die Vorhersage einer zu hohen Temperatur im Ofenstrang allein auf eine zu langsame Kinetik der Entsäuerung zurückzuführen ist.

Ein weiterer Grund für die Abweichung der Temperatur ist die mögliche Ausbildung einer Feststoff-Strähne aus Kalkmehl im Ofenstrang. Bei den Simulationen wurde angenommen, dass das Mehl bereits auf der Rutsche, also etwa auf Höhe der Mehleinträge, aufgewirbelt wird. Möglicherweise bildet das Mehl jedoch am Rutschenende eine Feststoff-Strähne, die nach unten in den Calcinatorfuß fällt und erst dort aufgewirbelt wird. Der Entsäuerungsvorgang würde dann schon etwa 6 m unterhalb des Mehleintrags beginnen, als Folge könnte die Temperatur im Ofenstrang sinken.

Da für die Messstelle "Tertiär unten" keine gemessenen Temperaturen zur Verfügung stehen, ist über die etwaige Ausbildung einer Feststoff-Strähne dort keine Aussage möglich. In der Ebene "Tertiär oben" liegen Messung, Referenzfall und Neubronner-Fall dicht beieinander, die beschleunigte Kinetik bewirkt hier eine deutlich zu niedrige Temperatur.

In den Ebenen "Calcinator Mitte" und "nach Pyrotop" liegen Messwerte und Simulationsergebnisse recht eng beieinander. Dort ist der Verbrennungsvorgang weitgehend und der Calcinierungsvorgang zum größten Teil abgeschlossen, so dass in diesem Bereich keine große Sensitivität mehr besteht.

In Abbildung 4-34 ist die berechnete Temperaturverteilung auf den Messebenen "Schacht oben" und "Calcinator Mitte" dargestellt. Beim wsgg-Modell wird eine verhältnismäßig gleichmäßige Temperaturverteilung über den Strömungsquerschnitt prognostiziert, die auch bei den Temperaturmessungen beobachtet wurde [Boden03.01]. Das Neubronner-Modell dagegen sagt eine deutliche Strähnenbildung voraus.

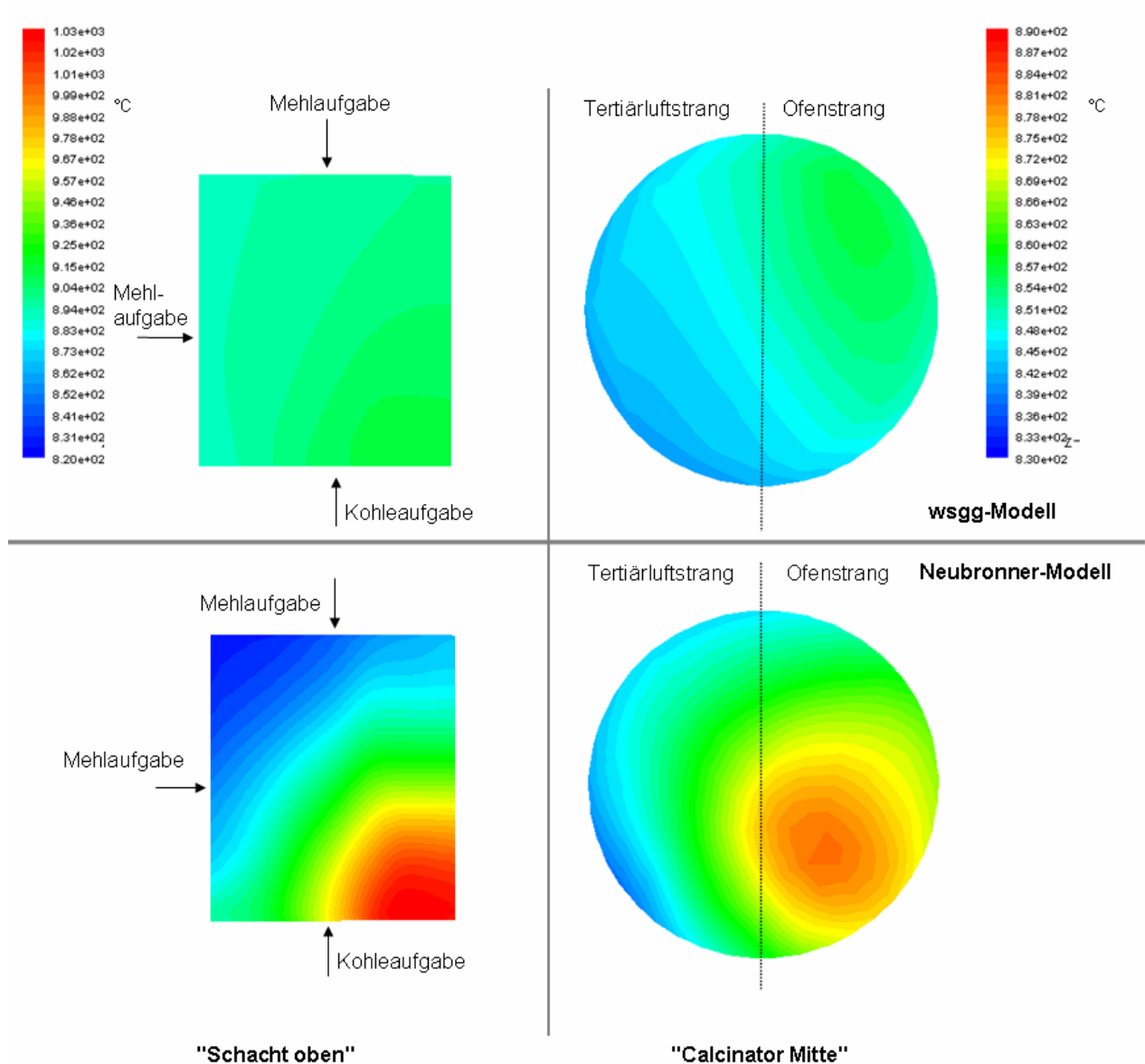


Abbildung 4-34: Temperaturverteilung auf den Messebenen "Schacht oben" (links) bzw. "Calcinator Mitte" (rechts), Berechnung mit dem wsgg-Modell (oben) bzw. Neubronner-Modell (unten)

In Abbildung 4-35 sind gemessene und berechnete Profile der Konzentrationen von CO, CO₂ und O₂ in der Ebene "Calcinator Mitte" dargestellt. Der Verlauf der Linie, auf der die Messungen erfolgten, wurde in Abbildung 4-32 dargestellt.

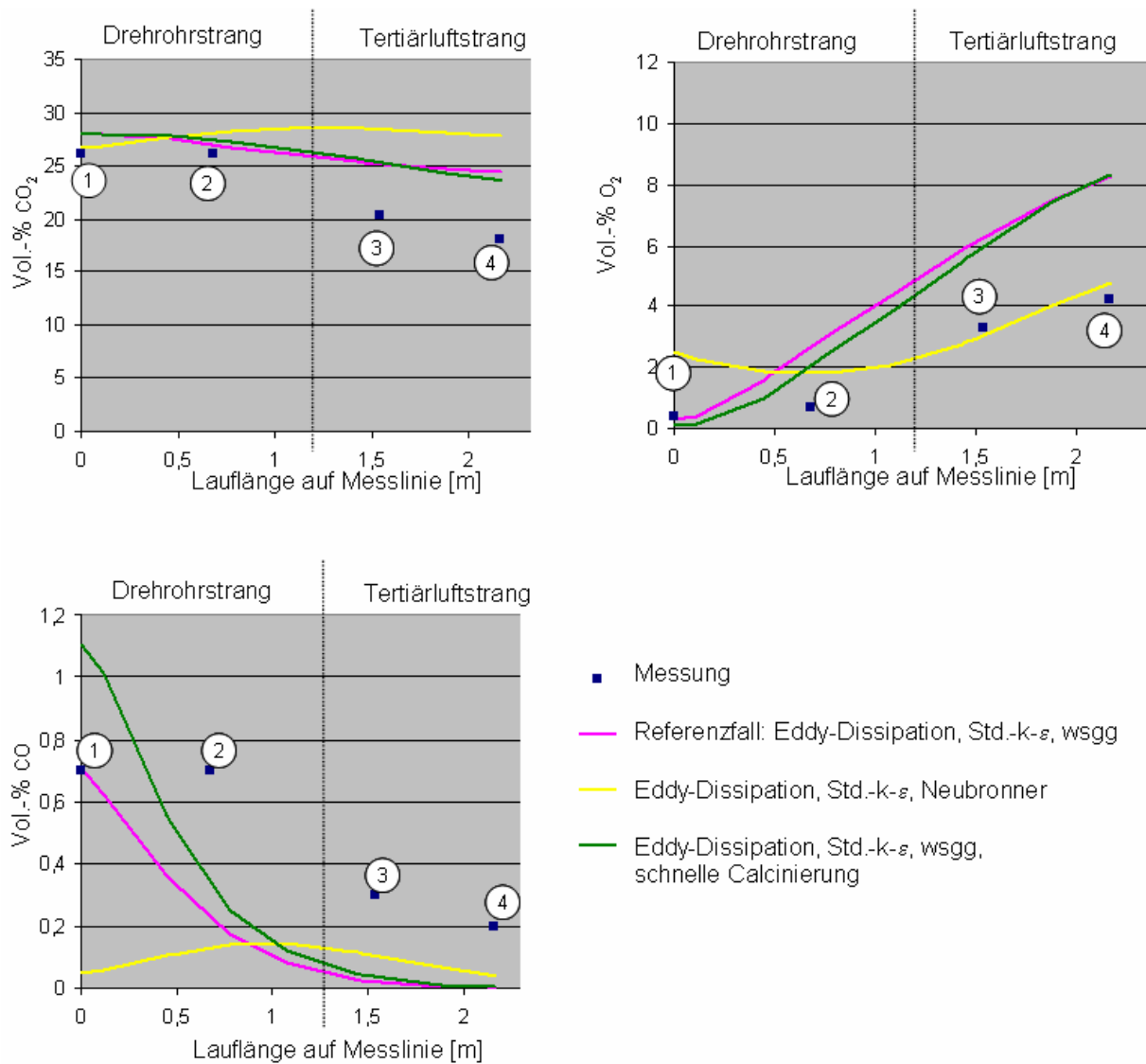


Abbildung 4-35: Profile der Gasphasenspezies in der Ebene "Calcinator Mitte"

Zwischen dem Referenzfall und der Rechnung mit schnellerer Entsäuerungskinetik zeigen sich nur geringe Unterschiede. Beide Rechnungen geben den Gradienten zwischen Ofenstrang-Strähne und Tertiärluftstrang-Strähne qualitativ gut wieder. Besonders in der Strähne des Drehrohrstrangs ist die quantitative Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung ebenfalls recht gut. Dies zeigt, dass die Randbedingungen des Drehrohr-Strangs mit der geschilderten Verbrennungsrechnung (Kapitel 4.3) gut erfasst werden. Bei der Strähne des Tertiärluftstrangs liegt der zu hohe Wert des berechneten Sauerstoffgehalts nahe, dass der Tertiärluft-Volumenstrom nicht so groß ist, wie bei den Simulationen angenommen. Der zu hohe CO₂-Gehalt in der Strähne verlangt dagegen einen noch höheren Tertiärluft-Volumenstrom, evtl. zusätzlich noch eine geringere Calcinierungsgeschwindigkeit im Tertiärluft-Strang.

Die CO-Konzentration wird in der Ofenstrang-Strähne recht gut vorhergesagt. Da dort die O₂-Konzentration sehr gering ist, kann eine Oxidation des CO nicht erfolgen. Unter den sauerstoffreichen Bedingungen des Tertiärluft-Strangs dagegen sagt das Eddy-Dissipation-Modell naturgemäß eine zu hohe Umsatzgeschwindigkeit voraus.

Die Verwendung von Strahlungswertwerten nach dem Ansatz von Neubronner (gelbe Linie) bewirkt die Ausprägung eines lokalen Extremwerts auf der Messlinie, die bei den Messungen nicht beobachtet wurde.

In Abbildung 4-36 sind querschnittsgemittelte Spezieskonzentrationen in den Messebenen dargestellt. Angesichts der Komplexität des Calcinierungsprozesses und der Unsicherheit, mit der viele Randbedingungen nur erfassbar waren, kann die qualitative und quantitative Übereinstimmung als recht gut bezeichnet werden. Auffällig ist, dass die Beschreibung des Ofenstrangs genauer gelingt als die des Tertiärluft-Strangs.

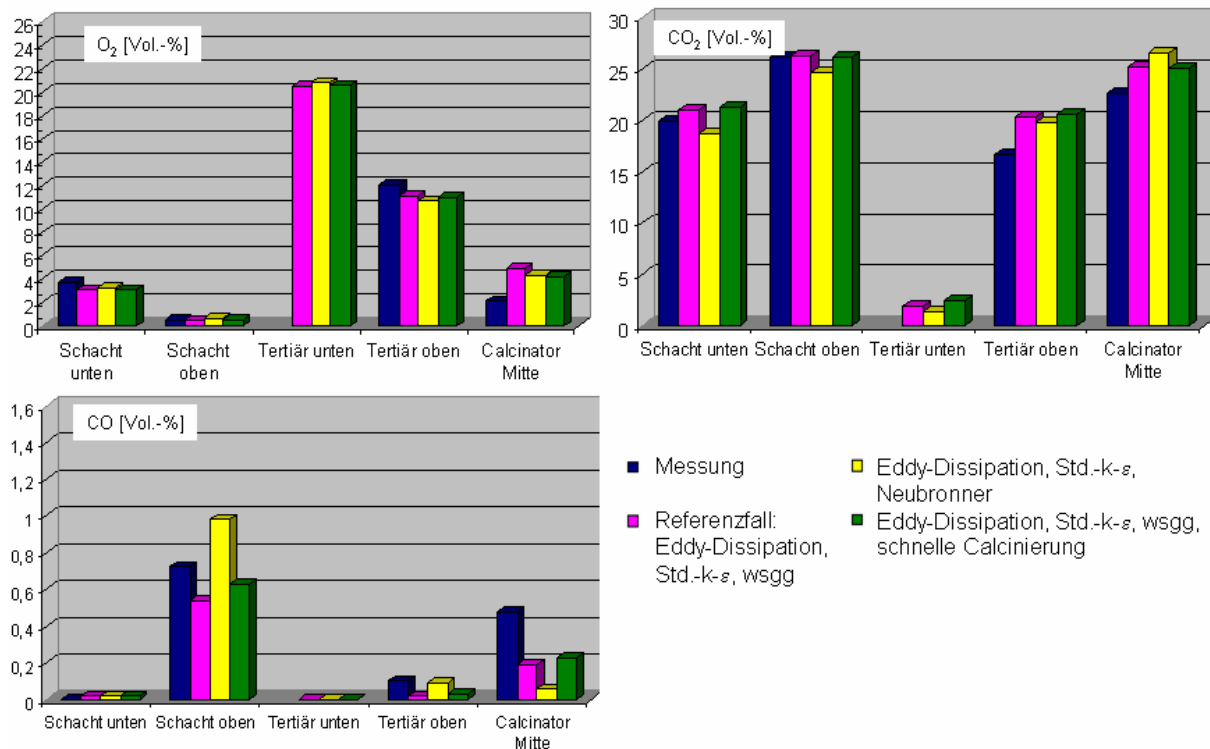


Abbildung 4-36: Querschnittsgemittelte Spezieskonzentrationen in den Messebenen

Als Ergebnis der bislang vorgestellten Rechnungen ist festzuhalten:

- Die Randbedingungen des Ofenstrangs können mit Hilfe einer Verbrennungsrechnung hinreichend genau erfasst werden.
- Das Modell für Strahlungswertwerte nach Neubronner sagt die deutliche Ausbildung von Temperaturstrahlen vorher, die bei den Messungen nicht beobachtet wurde. Darüber hinaus bewirkt es keine systematische Verbesserung bei der Temperaturvorhersage. Da außerdem die verwendeten Stoffwerte für Kalkmehl sehr unsicher sind, erscheint die Verwendung dieses Modells zur Zeit für die Calcinatorsimulation nicht sinnvoll.
- Der Einfluss der Kinetik der Entsäuerung auf den Calcinierungsprozess wird mit dem Vonderbank-Modell vermutlich im Wesentlichen ausreichend genau beschrieben. Eine im Rahmen der Simulationsgenauigkeit nennenswerte Sensitivität besteht erst, wenn die Reaktionskinetik um mindestens den Faktor drei beschleunigt wird.

- Das Eddy-Dissipation-Modell sagt unter den oxidierenden Bedingungen des Tertiärluft-Strangs und der Vormisch-Zone, in der die beiden Stränge zusammengeführt werden, einen deutlich zu schnellen CO-Ausbrand voraus. Da die "mixed = burnt"-Annahme des Modells bei der langsamen Kinetik des CO-Ausbrands nicht erfüllt ist, war dies zu erwarten.

4.4.4 Einfluss der Turbulenzmodulations-Modelle auf den Referenzfall

Abbildung 4-37 zeigt den Einfluss der Modulationsmodelle auf die kinetische Turbulenzenergie und deren Dissipationsrate. Das Modell der beladungsabhängigen turbulenten Viskosität (mit globaler Berücksichtigung der Beladung, vgl. Abschnitt 3.7) sagt die erwartete Dämpfung der Turbulenzenergie verbunden mit einer leichten Dämpfung der Dissipationsrate voraus. Bei Verwendung des Quellterm-Modells ergibt sich dagegen eine deutliche Steigerung von k und ε .

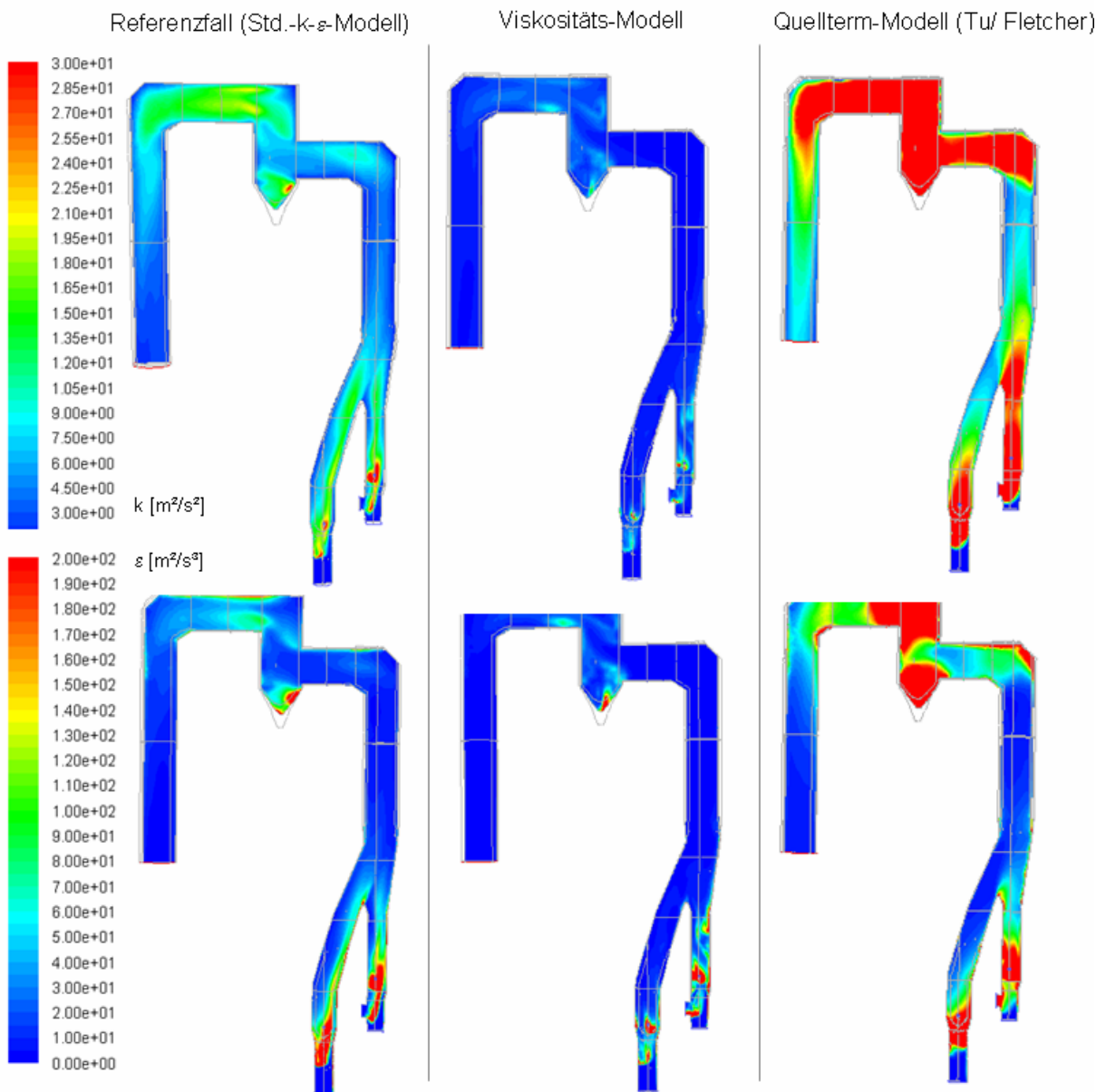


Abbildung 4-37: Einfluss des Modells zur Turbulenzmodulation auf k und ε

Die Reaktionsrate des CO-Ausbrands ist in Abbildung 4-38 dargestellt. Beim Viskositätsmodell ist sie gegenüber dem Referenzfall in der Vormischzone leicht reduziert, das Quelltermmodell sagt an dieser Stelle einen kurzen und unrealistisch intensiven CO-Ausbrand voraus.

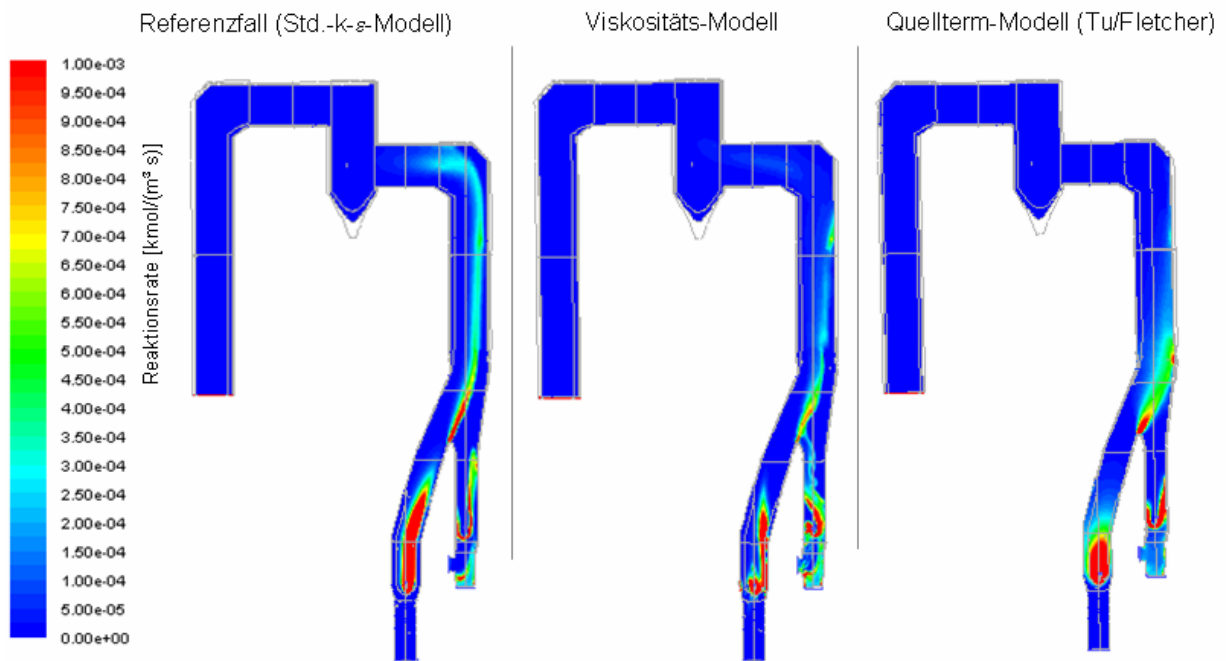


Abbildung 4-38: Reaktionsrate des CO-Ausbrands

Abbildung 4-39 zeigt den Quotienten ε/k , der nach dem Eddy-Dissipation-Modell ein Maß für die Vermischungsgeschwindigkeit der Spezies und damit für die Reaktionsgeschwindigkeit darstellt. Der Quotient ist beim Referenzfall und dem Viskositätsmodell annähernd gleich, da sich k und ε beim Viskositätsmodell um etwa den gleichen Faktor gegenüber dem Referenzfall ändern. Beim Quellterm-Modell dagegen ist die Vermischungsgeschwindigkeit trotz höherer Turbulenz deutlich geringer. Hier steigt die kinetische Turbulenzenergie viel stärker als ihre Dissipationsrate an, so dass der Quotient ε/k gegenüber dem Standardfall sinkt. Beim Quellterm-Modell wird also ein erhöhter CO-Umsatz vorhergesagt, obwohl die Vermischungsgeschwindigkeit der Edukte O_2 und CO gegenüber dem Referenzfall sinkt.

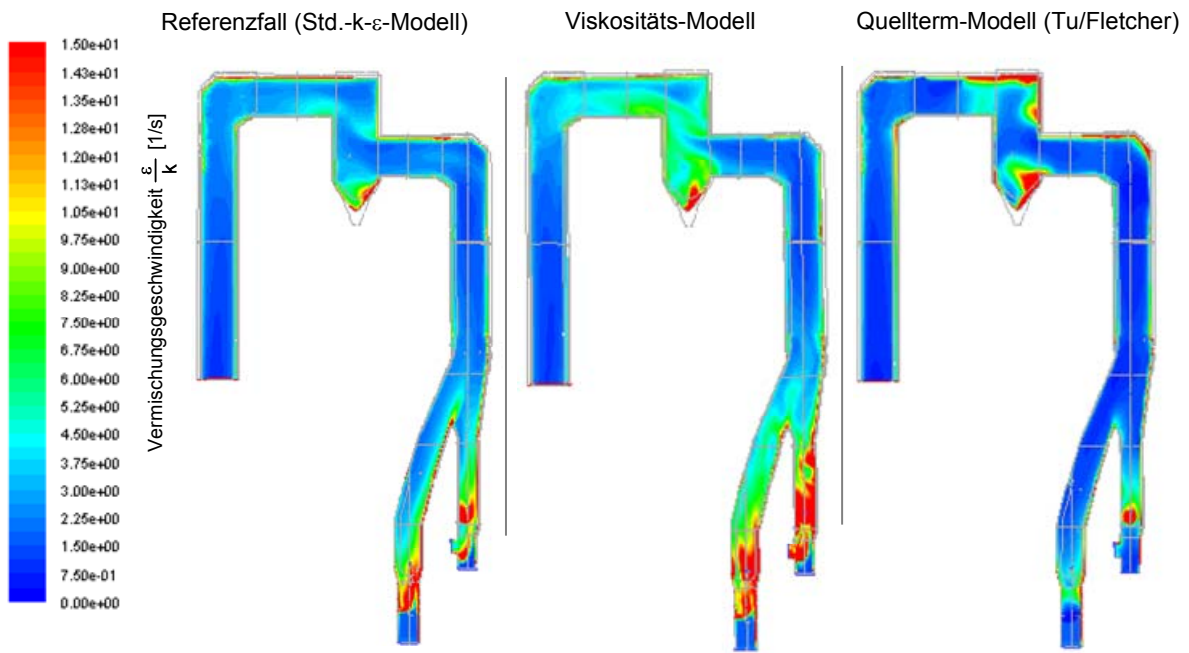


Abbildung 4-39: Vermischungsgeschwindigkeit der chemischen Spezies

Ursache für diese Beschleunigung ist die starke Zunahme des turbulenten Diffusionskoeffizienten bei Verwendung des Quelltermmodells, während er beim Viskositätsmodell abnimmt (Abbildung 4-40). Der turbulente Diffusionskoeffizient geht in der allgemeinen Transportgleichung eines Spezies-Massenbruchs (Gleichung 2-1, Abschnitt 2.1.1) als Γ_φ ein und beeinflusst so den turbulenzbedingten Speziestransport erheblich.

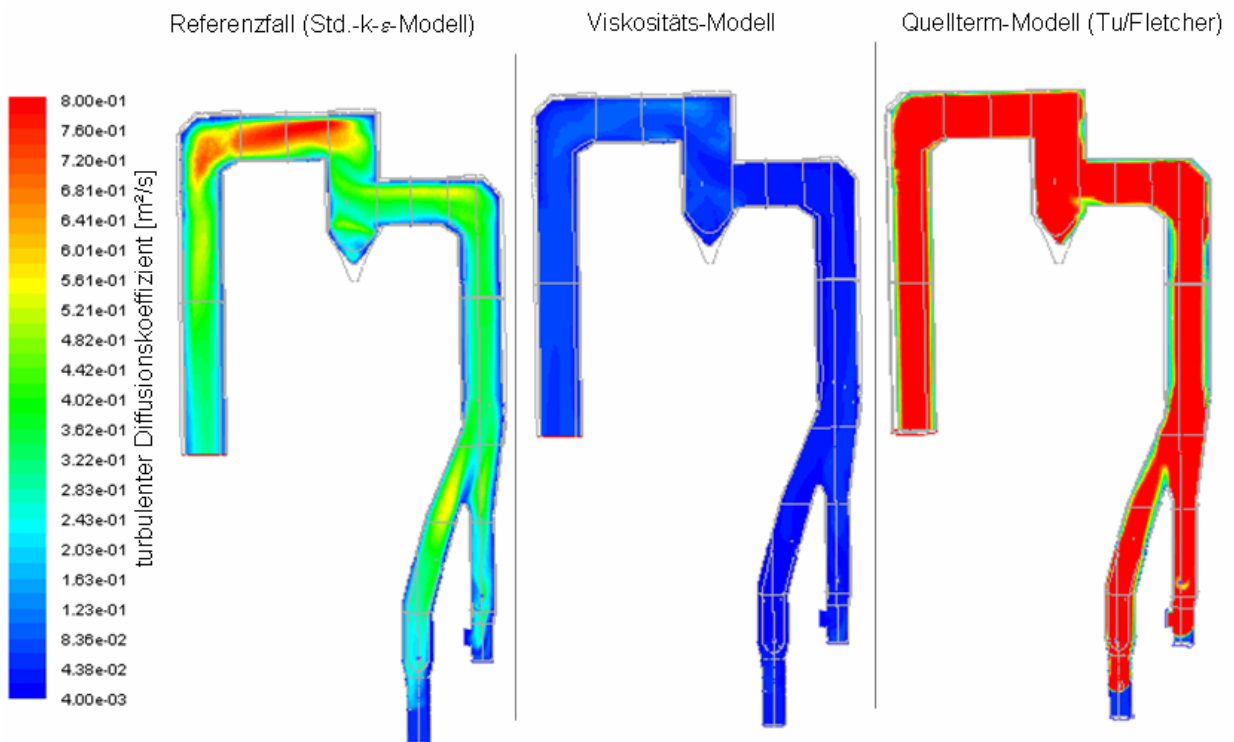


Abbildung 4-40: Turbulenter Diffusionskoeffizient von O₂

Das Ansteigen des Diffusionskoeffizienten bewirkt eine verstärkte horizontale Durchmischung der beiden Strähnen in der Vormischzone. Hierdurch kann das CO aus dem Ofenstrang rascher mit dem Sauerstoff aus der Strähne des Tertiärluftstrangs reagieren. Abbildung 4-41 zeigt den Einfluss der Turbulenzmodulation auf die Durchmischung der Strähnen in der Ebene "Calcinator Mitte". Bei der O₂- und der CO-Konzentration ist erkennbar, wie beim Viskositätsmodell die Strähnenmischung verlangsamt und beim Quelltermmodell beschleunigt wird, was den CO-Ausbrand beeinflusst.

Beim CO₂-Profil ist die Auswirkung nicht so deutlich sichtbar. Ursache hierfür ist zum einen, dass die absolute Konzentration des Kohlendioxids viel höher ist als die O₂- und CO-Konzentration, und die CO₂-Konzentrationsunterschiede zwischen den beiden Strängen relativ gesehen viel geringer sind als die Unterschiede bei der CO- und O₂-Konzentration. Zum anderen läuft die Entsäuerung des Kalkmehls bei geringeren CO₂-Konzentrationen schneller ab und kompensiert dadurch zum Teil einen ursprünglich geringeren CO₂-Gehalt in der Gasphase.

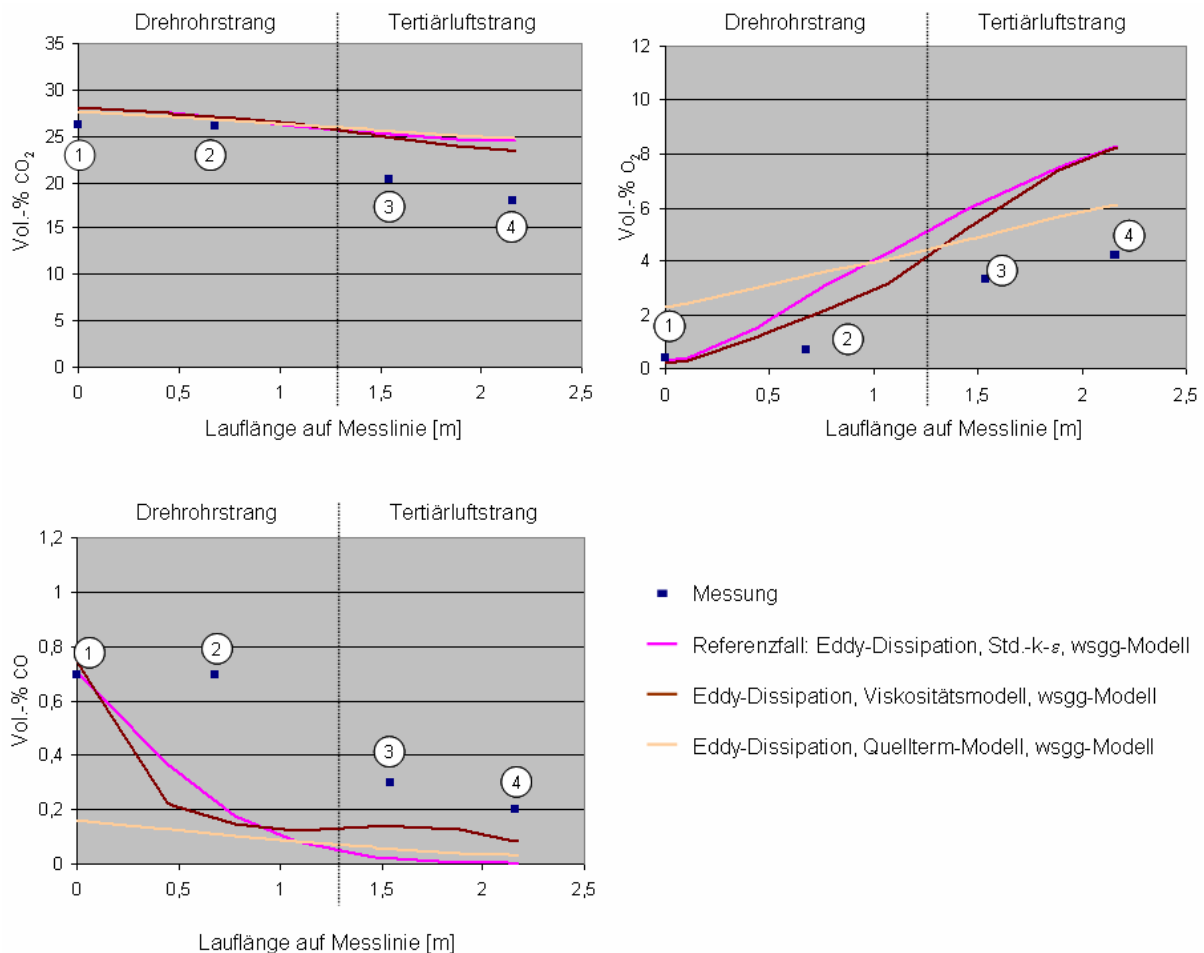


Abbildung 4-41: Profile der Gasphasenspezies in der Ebene "Calcinator Mitte"

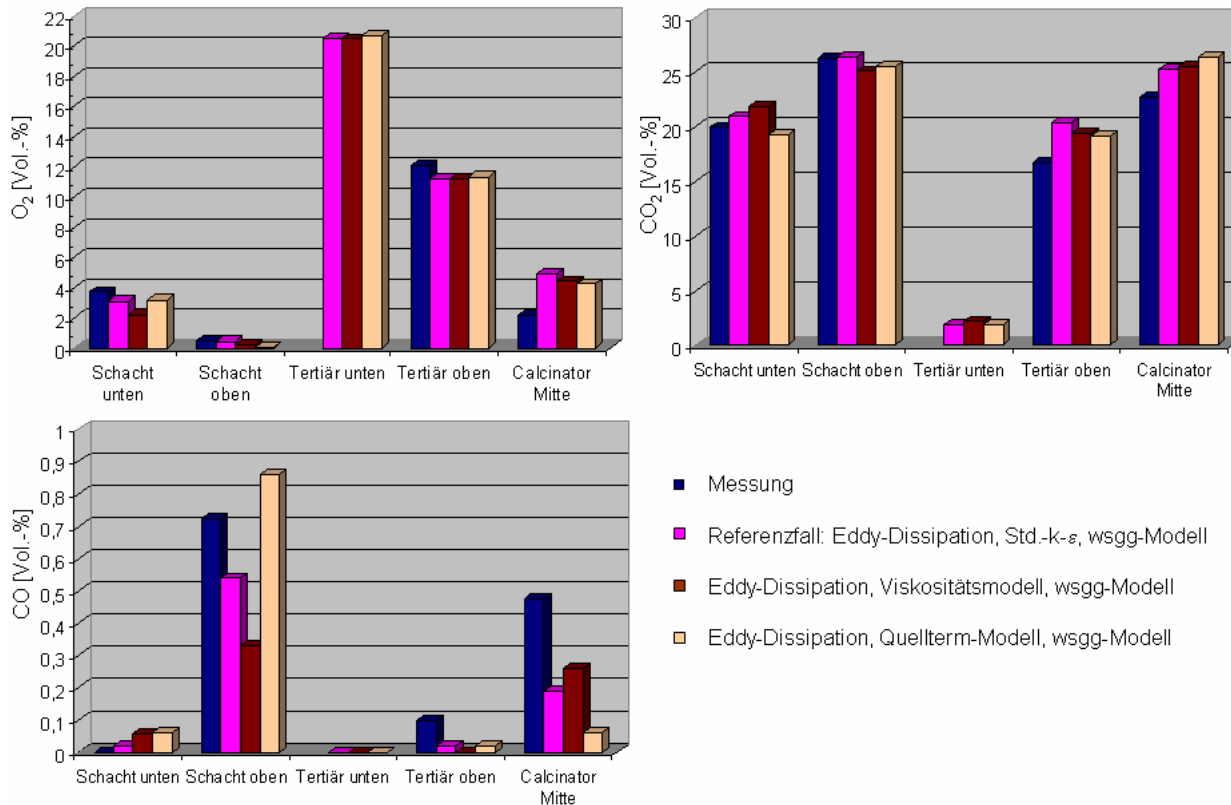


Abbildung 4-42: Querschnittsgemittelte Spezieskonzentrationen in den Messebenen

Obwohl das Viskositätsmodell die erwartete reduzierte Vermischung qualitativ vorhersagt, bewirkt es nur eine leichte Verbesserung bei der Vorhersage des CO-Profiles. Mögliche Ursachen hierfür sind:

- Grundsätzliche Unzulässigkeit der "mixed = burnt"-Annahme, auf der das Eddy-Dissipation-Modell beruht, beim CO-Ausbrand. Die Übervorhersage des CO-Ausbrands ist daher nicht unerwartet.
- Über die Verwendung des Eddy-Dissipation-Modells bei auftretender Turbulenzmodulation existieren bislang keine gesicherten Erkenntnisse. Insbesondere sind die experimentell ermittelten Modellparameter A und B des Eddy-Dissipation-Modells für Bedingungen, unter denen Turbulenzmodulation vorliegt, möglicherweise ungünstig gewählt. Die Werte dieser Konstanten wurden in der Literatur diskutiert [Liebe00.01].

Als Ergebnis der bisher vorgestellten Rechnungen mit unterschiedlichen Modellen zur Turbulenzmodulation ist festzustellen, dass nur das Viskositätsmodell die zu erwarteten Änderungen der Turbulenzstruktur qualitativ richtig beschreibt. Es erfüllt alle in Abschnitt 1.4 formulierten Bedingungen an ein Modell zur Beschreibung der Turbulenzmodulation einer hochbeladenen reaktiven Zweiphasenströmung in einer technischen Simulation.

Das Calcinierungsmodell, das Viskositätsmodell zur Turbulenzmodulation und das Zweischritt-Schema zur Beschreibung der Gasphasenreaktionen haben ihre grundsätzliche Eignung zur Modellierung des Vorcalcinierprozesses gezeigt. Das Calcinierungsmodell bestimmt die Verteilung von Temperatur und CO₂-Konzentration im Calcinator, während das Viskositätsmodell die Durchmischung der Gasphasen-

spezies beeinflusst. Diese hat wiederum Einfluss auf die Geschwindigkeit, mit der die chemischen Reaktionen, insbesondere der CO-Ausbrand, erfolgen. Während das Zweischritt-Schema zusammen mit dem Eddy-Dissipation-Modell die Energiefreisetzung durch den Brennstoffabbrand hinreichend genau abbildet, ist es zur Beschreibung des CO-Haushalts nur bedingt geeignet.

Für dessen Beschreibung ist ein Ansatz erforderlich, der sowohl den Einfluss der Turbulenz und als auch den der Reaktionskinetik auf den chemischen Umsatz berücksichtigt. Nach den bisherigen Ergebnissen ist das Eddy-Dissipation-Modell hierzu nicht in der Lage, da es auf der "mixed = burnt"-Annahme basiert. Das Eddy-Dissipation-Concept dagegen kann Turbulenz und Reaktionskinetik gleichzeitig berücksichtigen; so dass es den CO-Ausbrand vermutlich genauer vorhersagt. Da es bei der vorliegenden Arbeit nicht verwendet werden konnte, wurde ersatzweise die in Abschnitt 4.1.2 beschriebene Kopplung von Arrhenius-Ansatz und Eddy-Dissipation-Modell zur Beschreibung der Reaktionskinetik verwendet. Die mit dem Ersatzverfahren durchgeführten Berechnungen werden im nachfolgenden Abschnitt vorgestellt.

4.4.5 Beschreibung des chemischen Umsatzes mit dem Vierschritt-Schema

Gegenüber dem Zweischritt-Schema führt das Vierschritt-Schema die zusätzlichen Zwischenprodukte Methan und Wasserstoff ein, die Anzahl der Reaktionsgleichungen erhöht sich von 2 auf 6. Nachfolgend wird eine Rechnung vorgestellt, bei der das Vierschritt-Schema in Kombination mit den von Jones und Lindstedt vermessenen Reaktionskinetiken, sowie das Standard-k- ϵ -Modell und das wsgg-Modell verwendet wurden.

In Abbildung 4-43 ist die Konzentration der Kohleflüchtigen und der Zwischenprodukte Methan und Wasserstoff in den Brennebenen dargestellt. Die Flüchtigen treten wie beim Zweischritt-Mechanismus nur in unmittelbarer Umgebung der Brennermündung auf, da sie sehr schnell zu ihren Folgeprodukten CH_4 , CO und H_2 zerfallen. Infolge des Luftsauerstoff-Mangels im Drehrohrstrang ist dort der Wasserstoff-Abbrand gehemmt und findet teilweise erst nach Vermischung der Ofenstrang-Strähne mit der Tertiärluft-Strähne statt. Der Methan-Abbrand dagegen kann auch in Abwesenheit von Luftsauerstoff mit H_2O als Oxidationsmittel erfolgen (Schema 4-3, Reaktion 3), diese Reaktion dominiert selbst im Tertiärluftstrang gegenüber der Reaktion mit Luftsauerstoff (Schema 4-3, Reaktion 2). Die Reaktionsraten dieser beiden konkurrierenden Reaktionen sind in Abbildung 4-44 dargestellt.

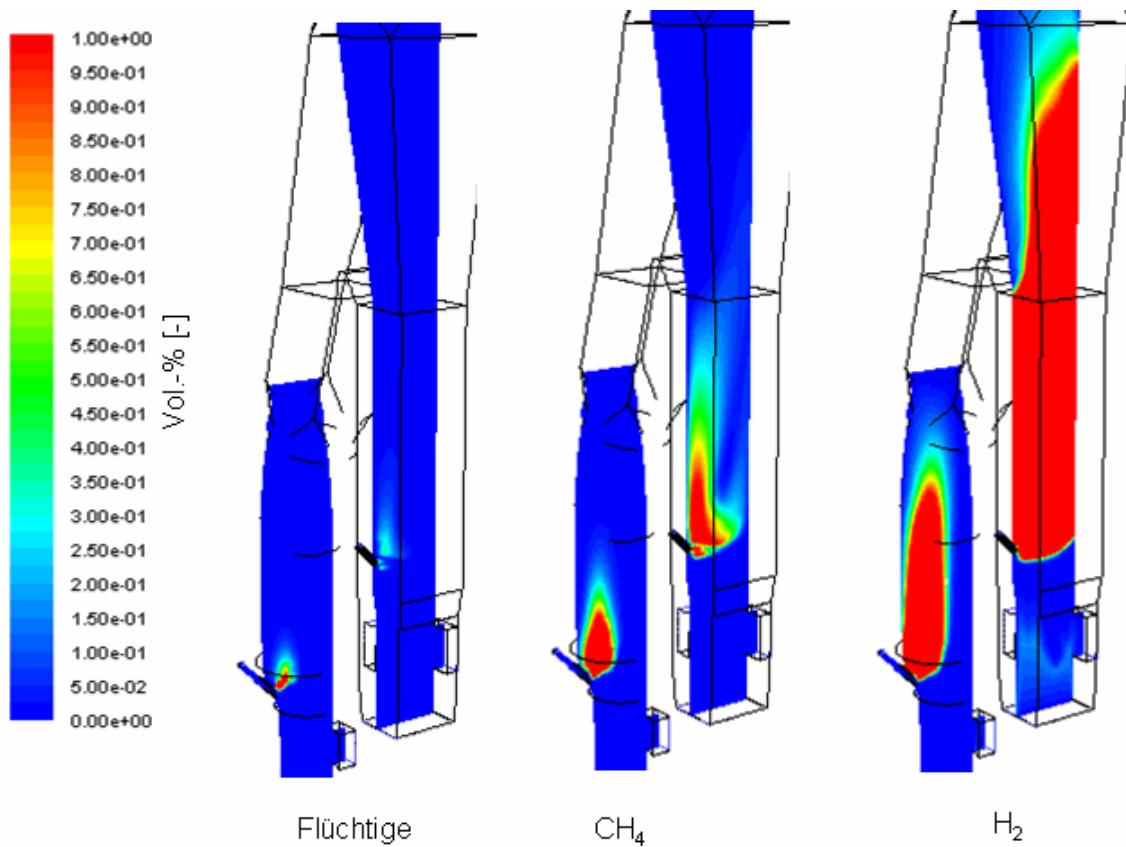


Abbildung 4-43: Konzentration von Kohleflüchtigen, CH₄ und H₂ im Calcinator

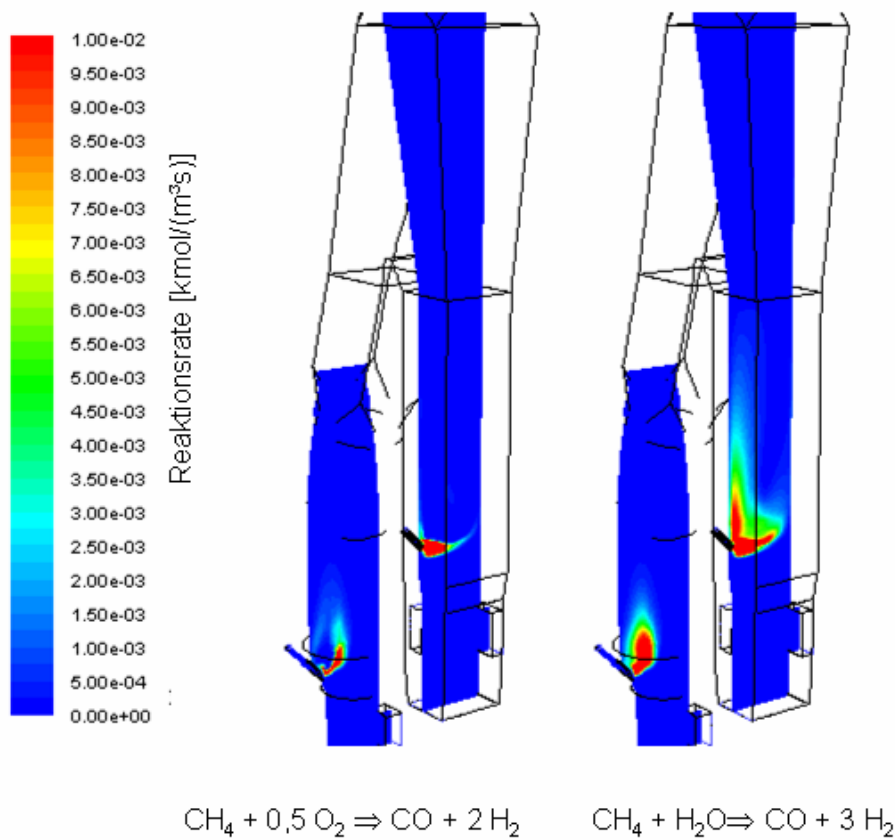


Abbildung 4-44: Reaktionsraten der konkurrierenden Methan-Reaktionen

Abbildung 4-45 zeigt den Einfluss des Reaktionsmodells auf den CO-Gehalt. Bei Verwendung des kinetischen Modells erfolgt der Abbau des Kohlenmonoxids im Ofenstrang deutlich langsamer. Im Tertiärluftstrang ist der CO-Ausbrand beim kinetischen Ansatz nur unwesentlich gegenüber dem Eddy-Dissipation-Modell verzögert.

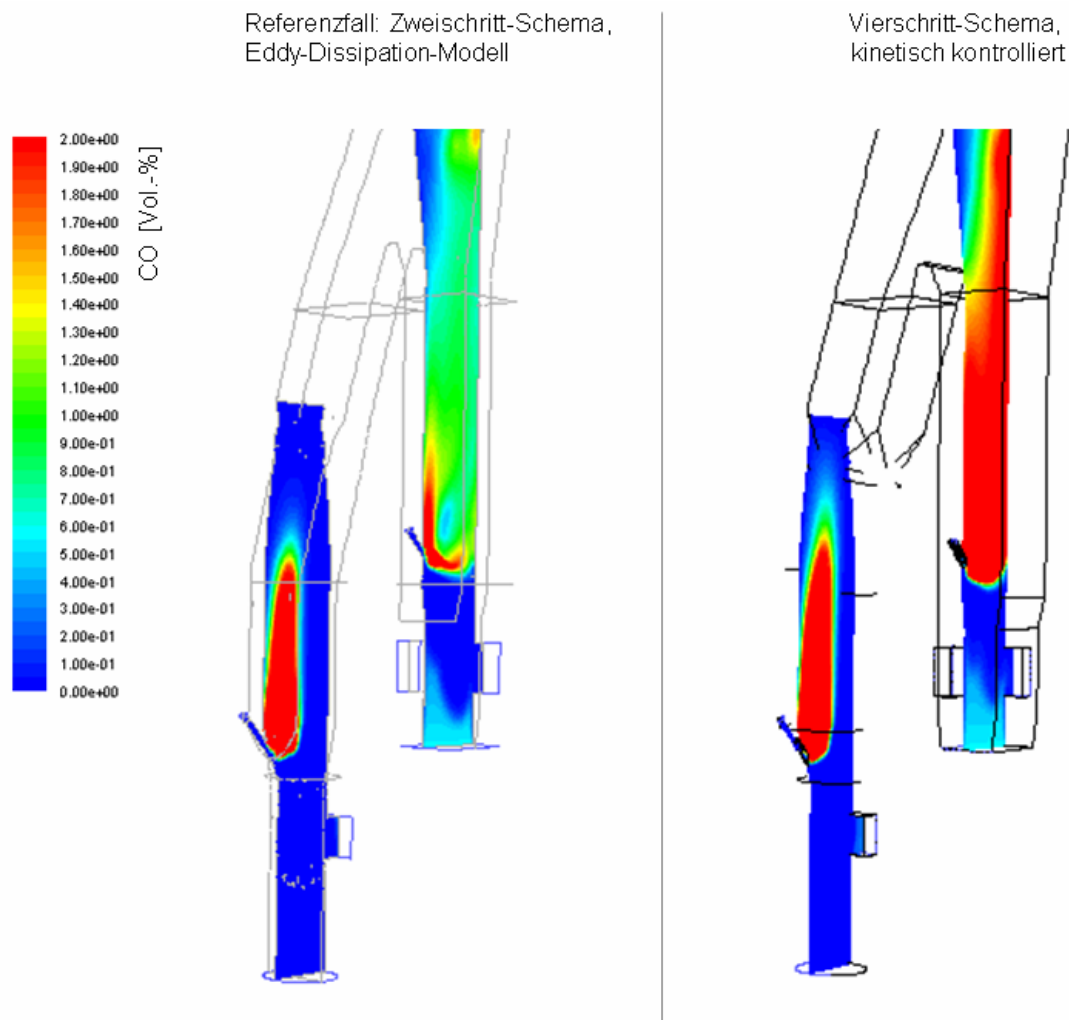


Abbildung 4-45: CO-Gehalt in den Brennebenen

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden mit dem Vierschritt-Schema weitere Rechnungen durchgeführt, bei denen zur Beschreibung der Turbulenzmodulation das Modell der beladungsabhängigen turbulenten Viskosität sowohl mit lokaler als auch mit globaler Berücksichtigung der Beladung (vgl. Abschnitt 3.7) verwendet wurde. Die so berechneten Profile der Gasphasenspezies sind in Abbildung 4-46 dargestellt, Abbildung 4-47 zeigt die querschnittsgemittelten Ergebnisse.

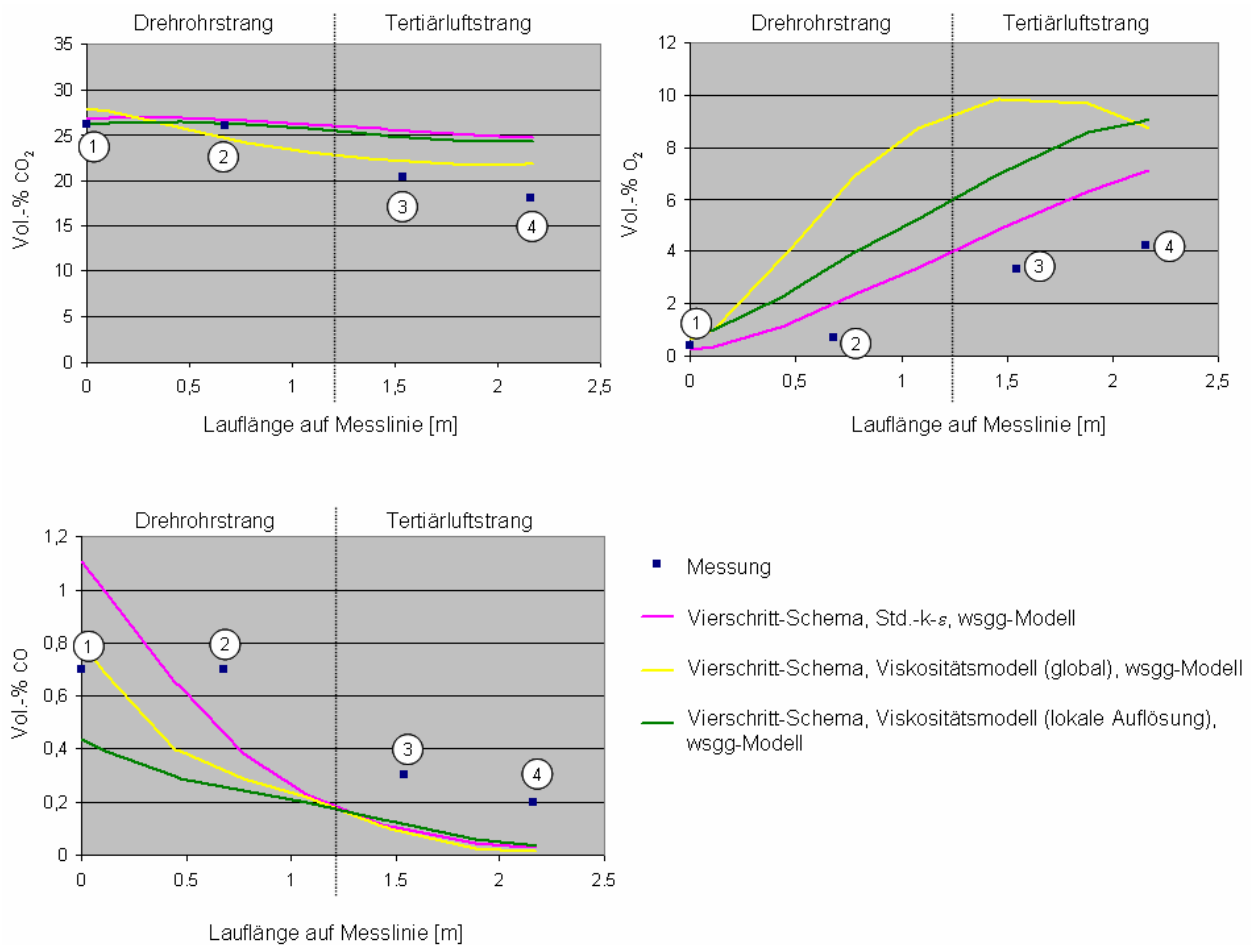


Abbildung 4-46: Profile der Gasphasenspezies in der Ebene "Calcinator Mitte"

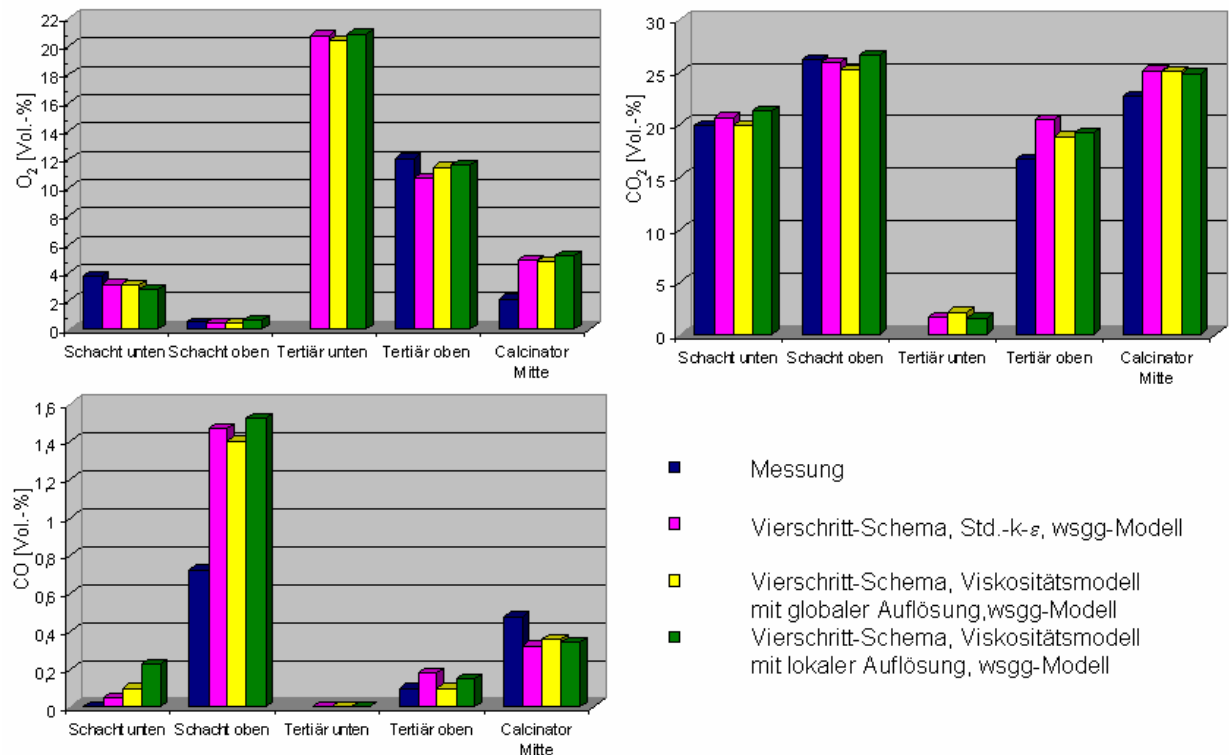


Abbildung 4-47: Querschnittsgemittelte Spezieskonzentrationen in den Messebenen

Auffällig ist der parabolische Verlauf des O_2 -Profils sowie das stark von den bisherigen Profilverläufen abweichende CO_2 -Profil beim Viskositätsmodell mit globaler Auflösung. Die querschnittgemittelten Konzentrationen zeigen jedoch keine Auffälligkeit. Es ist daher nicht auszuschließen dass sich im Lauf der Berechnung eine temporäre, örtlich begrenzte Strähne gebildet hat, die für das Ergebnis nur eine geringe Relevanz besitzt.

In Abbildung 4-48 sind die kinetische Turbulenzenergie und ihre Dissipationsrate bei den drei vorgestellten Berechnungsfällen (Standard-k- ε -Modell, Berücksichtigung der lokalen bzw. globalen Beladung beim Viskositätsmodell) dargestellt. Die Verwendung der lokalen Beladung bewirkt hauptsächlich in den Bereichen, in denen besonders hohe Feststoffkonzentrationen auftreten (Umgebung der Brennermündungen und der Mehleinträge) eine Dämpfung von kinetischer Turbulenzenergie und Dissipationsrate. Die Verwendung der globalen Beladung dämpft die Turbulenz auch in den Regionen stark, in denen nur eine geringe Beladung vorliegt.

Abbildung 4-49 zeigt die querschnittsgemittelten Turbulenzkenngößen k , ε und ε/k (Maß für die Vermischungsgeschwindigkeit nach dem Eddy-Dissipation-Modell) in der Messebene "Calcinator Mitte". Bei Verwendung der lokalen Beladung werden k und ε gegenüber dem Standardfall um etwa 65% gedämpft. Bei Verwendung der globalen Beladung ergibt sich dagegen eine sehr hohe Dämpfung um ca. 90% gegenüber dem Standard-k- ε -Modell. Der Quotient ε/k ändert sich, da k und ε etwa im gleichen Maße reduziert werden, nur um ca. 10%.

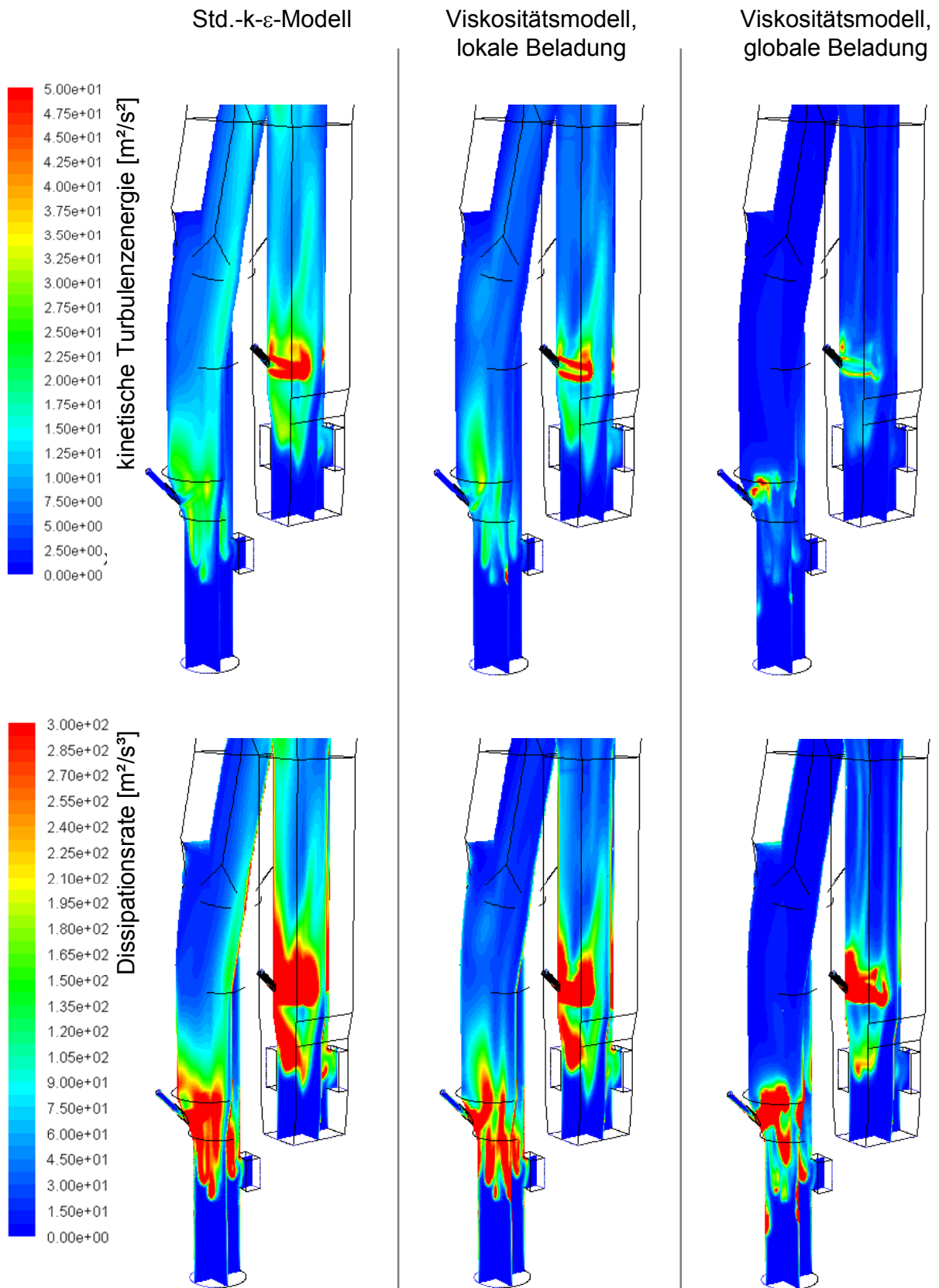


Abbildung 4-48: Kinetische Turbulenzenergie und Dissipationsrate bei verschiedenen Modellen für die turbulente Viskosität

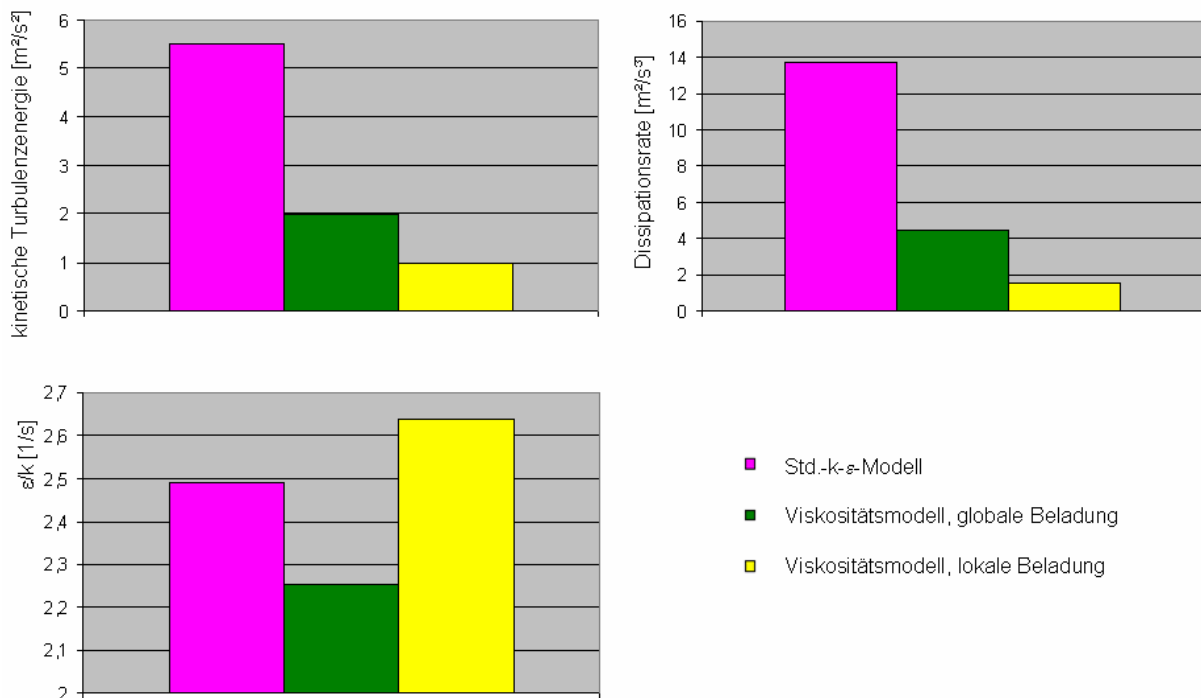


Abbildung 4-49: Kenngrößen der Turbulenz in der Messebene "Calcinator Mitte"

Als Ergebnis der durchgeführten Rechnungen ist festzustellen, dass das Vonderbank-Modell zur Beschreibung von Calcinations- und Sulfatierungsreaktion geeignet ist und verhältnismäßig gute Vorhersagen zur Temperatur und CO₂-Freisetzung im Calcinator liefert. Im Drehrohrstrang wurden zwar bei allen Rechnungen zu hohe Temperaturen vorhergesagt, doch zeigte die durchgeführte Parameterstudie zur Kinetik der Entsäuerung, dass die Temperaturabweichung zumindest nicht ausschließlich auf eine zu langsame Entsäuerungsreaktion zurückgeführt werden kann.

Die Verwendung des Neubronner-Modells zur Beschreibung der Strahlungsstoffwerte der partikelbeladenen Strömung bringt keine Verbesserung. Es sagt eine starke Ausbildung von Temperaturstrahlen im Calcinator voraus, die bei den Messungen nicht beobachtet wurde, und erbrachte keine systematische Verbesserung bei der Temperaturvorhersage. Da die für das Modell verwendeten Stoffwerte für Kalkmehl sehr unsicher sind, lässt sich nicht sagen, ob das schlechte Abschneiden des Modells auf diese zurückzuführen ist, oder ob das Modell grundsätzlich nicht geeignet ist. Solange keine besseren Stoffwerte verfügbar sind, sollte auf das Neubronner-Modell verzichtet und die Strahlungsstoffwerte - unter Vernachlässigung des Partikeleinflusses - mit dem wsgg-Modell berechnet werden. Die mit dem Neubronner-Modell durchgeführten Simulationen zeigen jedoch, dass seine Verwendung bei Calcinationsimulationen technisch möglich ist, also die durch seine Verwendung entstehenden Konvergenzprobleme beherrschbar sind.

Der Ersatz des Zweischritt-Schemas mit Eddy-Dissipation-Modell durch das Vierschritt-Schema mit reaktionskinetischem Ansatz bewirkt keine wesentliche Verbesserung bei der Vorhersage des CO-Ausbrands. Tendenziell sagen beide Ansätze einen schnelleren CO-Ausbrand voraus, als ihn die Messwerte dokumentieren. Während dies beim Eddy-Dissipation-Modell zu erwarten war,

erstaunt es, dass der kinetische Ansatz einen nur geringfügig langsameren CO-Ausbrand vorhersagt. Dies könnte darauf zurückzuführen sein, dass dessen kinetische Daten nur bei einem maximalen CO₂-Gehalt von ca. 10 Vol.-% ermittelt wurden, während der mittlere CO₂-Gehalt im Calcinator bei etwa 20 Vol.-% liegt. Über den zulässigen Wertebereich der angegebenen Kinetiken machen die Autoren keine Angaben [Jones88.01]. Zusätzlich sollte bedacht werden, dass die beim Vierschritt-Schema verwendete Kombination aus Eddy-Dissipation-Modell und Arrhenius-Ansätzen nur einen behelfsmäßigen Ersatz für das Eddy-Dissipation-Concept (vgl. Abschnitt 2.5.2.3) darstellt, auf dessen Benutzung im Rahmen dieser Arbeit verzichtet werden musste (vgl. Abschnitt 4.1.2). Bei Verwendung des Eddy-Dissipation-Concept könnte der CO-Ausbrand eventuell genauer beschrieben werden.

Darüber hinaus ist zu berücksichtigen, dass der Volumenanteil des CO sehr gering ist und die numerisch bedingte Ungenauigkeit bei der Berechnung des CO-Gehalts (geschätzte $\pm 0,3$ Vol.-%-Punkte) bereits in der Größenordnung des CO-Gehalts selbst liegt. Ferner können die gemessenen CO-Konzentrationen Messunsicherheiten aufweisen.

Vor diesem Hintergrund ist der zusätzliche numerische Aufwand, den das Vierschritt-Schema gegenüber dem Zweischritt-Schema verlangt, nicht zu rechtfertigen. Das Zweischritt-Schema stellt unter Betrachtung von Rechenzeit, numerischer Stabilität und Vorhersagegenauigkeit gegenwärtig den besseren Kompromiss dar.

Für eine weitere Verbesserung der CFD-Simulation des Vorcalcinierprozesses ist jedoch eine genaue Beschreibung des CO-Ausbrands und des damit verbundenen O₂-Haushalts erforderlich, da diese die Voraussetzung für eine Beschreibung der NO_x-Bildung bzw. des NO_x-Abbaus im Calcinator sind. Die möglichst exakte Beschreibung der Vermischung von CO und O₂ im Calcinator, die durch die auftretende Turbulenzmodulation verlangsamt wird, ist daher erforderlich.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde untersucht, mit welchen Modellen der numerischen Strömungssimulation (CFD) die Beschreibung der Turbulenzmodulation einer hochbeladenen reaktiven Zweiphasenströmung eines großindustriellen Prozesses erfolgen kann. Diese Untersuchung wurde beispielhaft am Vorcalcinierprozess der Zementindustrie durchgeführt.

Mit Turbulenzmodulation wird die Beeinflussung der Turbulenz eines Fluids (in diesem Fall durch Partikel) bezeichnet. Durch diese Beeinflussung kann die Turbulenz der Fluidphase sowohl zunehmen als auch sinken. Turbulenzmodulation tritt bei hochbeladenen Zweiphasenströmungen auf, die u. a. in der pneumatischen Förderung, in Wirbelschichten, Blasensäulen, Zyklonabscheidern oder beim Vorcalcinierprozess vorkommen können. Beim Vorcalcinator dämpfen die Partikel aufgrund ihrer geringen Größe die Turbulenz.

Der Vorcalcinierprozess ist ein komplexer Prozess, dessen einzelne Teilvorgänge (Verbrennung der eingesetzten Brennstoffe, heterogene Reaktionen im Kalkmehl, chemische Reaktionen in der Gasphase, Beeinflussung von Strahlungswärmeaustausch und Gasphasenturbulenz durch die anwesenden Partikel) sich gegenseitig beeinflussen. Diese gegenseitige Abhängigkeit muss bei der Simulation des Prozesses von den Submodellen, die diese Einzelvorgänge beschreiben, berücksichtigt werden.

Die CFD-Simulation des Vorcalcinierprozesses ist nicht nur wegen dieser Komplexität ihrer mathematischen Modellierung, sondern auch wegen der numerischen Probleme bei der Lösung der Modellgleichungen vergleichsweise aufwändig. Die starke Kopplung der einzelnen - meist nicht linearen - Modelle verschlechtert das Konvergenzverhalten des zu lösenden Gleichungssystems, die starken Quellterme des Kalkmehlmodells verschärfen diese Problematik und verlangen die Diskretisierung des großen Apparates mit einem feinen Gitter. Dies erfordert hohe Rechenleistungen.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde untersucht, wie unter den geschilderten Bedingungen die Beschreibung der Turbulenzmodulation erfolgen kann. Als Ausgangsmodell wurde das Standard-k- ε -Modell verwendet, das bei der Beschreibung der Turbulenz von Einphasenströmungen seit langem etabliert ist. Es zeichnet sich durch geringen Rechenzeitbedarf, numerische Robustheit und ein vertieftes Verständnis seiner Vorhersagegüte aus. Für die Beschreibung der Turbulenzmodulation einer zweiphasigen Strömung kann dieses Modell angepasst werden, zum einen durch zusätzliche Quellterme für die Modellgrößen k (kinetische Turbulenzenergie) und ε (Dissipationsrate der kinetischen Turbulenzenergie), zum anderen durch eine beladungsabhängige Modellierung der turbulenten Viskosität. Diese wird beim Standard-k- ε -Modell meist mit der Prandtl-Kolmogorov-Beziehung modelliert, die zur Beschreibung einer Zweiphasenströmung angepasst werden kann. In der Vergangenheit wurden verschiedene Quellterm- und Viskositätsmodelle in der Literatur veröffentlicht.

Eine Auswahl von Modellen wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit für den CFD-Code FLUENT[®] implementiert. Anschließend wurden unter Verwendung dieser Modelle in der Literatur dokumentierte Experimente zur Turbulenzmodulation in

Laboranlagen simuliert. Die Simulationsergebnisse wurden mit den Messwerten aus den Experimenten verglichen. Keines der untersuchten Modelle konnte die Anforderungen an numerische Stabilität und Vorhersagegenauigkeit erfüllen. Daher wurde ein existierendes Modell der beladungsabhängigen turbulenten Viskosität weiterentwickelt. Dabei wurde folgendes nachgewiesen:

- Es genügt, die Turbulenzmodulation im Strömungskern der Laboranlagen zu betrachten. Eine Berücksichtigung der Turbulenzmodulation im Wandbereich der Strömung ist nicht erforderlich.
- Bei der Modellierung der Turbulenzmodulation kann anstelle der (lokalen) Gasphasenbeladung der einzelnen Zelle die (globale) Gasphasenbeladung des betrachteten Apparates verwendet werden. Hierdurch wird eine Vereinfachung erreicht. Voraussetzung ist jedoch, dass die Partikeldispersion nicht zu ungleichmäßig erfolgt.

Das im Rahmen der vorliegenden Arbeit vorgestellte Modell weist die notwendige numerische Stabilität auf und zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten aus den Laboruntersuchungen. Bei einer Beladung von 1,5 kg Feststoff/kg Gas wurde an der Laboranlage eine etwa 60-%ige Turbulenzdämpfung gemessen, die auch vom Modell vorhergesagt wird.

Anschließend an die Modellentwicklung wurden CFD-Simulationen eines zwei-strängigen Calcinator durchgeföhrt. Mittels einer Sensitivitätsanalyse wurde hier nachgewiesen, dass das verwendete Modell zur Beschreibung der Calcinierungs- und Sulfatierungsreaktion des Kalkmehls eine hinreichende Genauigkeit besitzt. Danach wurde der Einfluss der Strahlungsstoffwerte auf die Temperaturverteilung im Calcinator untersucht. Während das wsgg-Modell den Einfluss der Partikel auf die Strahlungsstoffwerte vernachlässigt, wird der Partikeleinfluss beim Neubronner-Modell berücksichtigt. Das Neubronner-Modell sagte jedoch die Ausbildung von Temperaturströhnen voraus, die nach den Messungen nicht auftritt. Das unbefriedigende Abschneiden dieses Modells könnte auf die unsicheren zur Verfügung stehenden Stoffwerte für Kalkmehl zurückzuführen sein.

Bei weiteren Simulationen wurden Rechnungen nach einem Zweischnitt-Reaktionschema solchen nach einem Vierschnitt-Schema gegenübergestellt. Beim Zweischnitt-Schema wird CO als alleiniges Zwischenprodukt beim Abbrand der flüchtigen Kohlebestandteile betrachtet, die Beschreibung der Reaktionskinetik erfolgte mit der "mixed = burnt"-Annahme. Hiermit wurde ein zu schneller CO-Ausbrand vorhergesagt. Das Vierschnitt-Schema betrachtet neben CO die zusätzlichen Zwischenprodukte Methan und Wasserstoff und benutzt Arrhenius-Ansätze mit experimentell ermittelten Parametern zur Beschreibung der Reaktionskinetik. Das Vierschnitt-Schema erhöht den Rechenaufwand beträchtlich, erbrachte jedoch keine wesentliche Verbesserung bei der Beschreibung des CO-Ausbrands im Calcinator.

Nach diesen Voruntersuchungen erfolgten abschließend Rechnungen, bei denen die Turbulenzmodulation durch die Partikel berücksichtigt wurde. Das verwendete Quelltermmodell von Tu und Fletcher sagte nicht die erwartete Turbulenzdämpfung, sondern eine Erhöhung der Turbulenz voraus. Das im Rahmen der vorliegenden Arbeit weiterentwickelte Modell der beladungsabhängigen turbulenten Viskosität sagte dagegen eine etwa 65-%ige Dämpfung der Turbulenz im Calcinator gegenüber

dem Standard-k- ϵ -Modell voraus. Dieses Ergebnis stimmt gut mit der bei Laborversuchen gemessenen 60-%igen Dämpfung überein. Bei Verwendung dieses Modells wird weiterhin die reduzierte Vermischung der Gasphasenspezies infolge der Verringerung der Turbulenz vorhergesagt.

Weitere Rechnungen zeigten, dass von allen untersuchten Quellterm- und Viskositätsmodellen nur das weiterentwickelte Viskositätsmodell alle Anforderungen bezüglich numerischer Stabilität und Vorhersagegenauigkeit erfüllt. Darüber hinaus beansprucht es wenig Rechenzeit und kann leicht für unterschiedliche CFD-Codes implementiert werden. Dieses Modell gestattet die Berücksichtigung der Turbulenzmodulation bei der CFD-Simulation komplexer großindustrieller Prozesse und leistet damit einen Beitrag zur Verbesserung der Beschreibung von CO-Ausbrand und NO_x-Abbau beim Vorcalciniertprozess, die von der Turbulenzmodulation beeinflusst werden.

In seiner gegenwärtigen Form ist das Modell der beladungsabhängigen turbulenten Viskosität an Fluidströmungen mit monodispersen Partikeln angepasst, weil nur für solche eine hinreichende Basis an Messwerten aus Experimenten vorhanden ist. Eine Erweiterung auf polydisperse Partikel ist wünschenswert, verlangt jedoch den vorherigen Aufbau einer Datenbasis entsprechender Messwerte. Die Durchführung von Messungen zur Turbulenzmodulation durch polydisperse Partikel ist daher Voraussetzung für eine Weiterentwicklung des vorgestellten Modells.

6 Literaturverzeichnis

- [Aboua85.01] Abou-Arab, T. W.; Turbulence models for two-phase flows; Encyclopedia of Fluid Mechanics; Vol. III; Gulf Publ. Co.; Houston; 1985.
- [Aboua88.01] Abou-Arab, T. W., Roco, M. C.; Solid phase contribution in the two-phase turbulence kinetic energy equation; Proc. 3rd Int. Symp. on Liquid-Solid Flows; ASME New York; 1988.
- [Abram70.01] Abramovich, G. N.; The effect of admixture of solid particles or droplets on the structure of a turbulent gas jet; Soviet Phys. Dokl.; S. 190, 1970.
- [Adeni88.01] Adeniji-Fashola, A., Chen P., C., Schafer, C. F.; Numerical predictions of two-phase gas-particle flows using Eulerian and Lagrangian schemes; NASA technical paper; 1988.
- [Adeni90.01] Adeniji-Fashola, A., Chen, C. P.; Modelling of confined turbulent fluid-particle flows using Eulerian and Lagrangian schemes; Int. J. Heat and Mass Transfer; 33, 1990.
- [Afzal82.01] Afzal, N.; Fully developed turbulent flow in a pipe: An intermediate layer; Ang. Arch.; 52, 1982.
- [Altaw77.01] Al-Taweel, A. M., Landau, J.; Turbulence modulation in two-phase jets; Int. J. Multiphase Flow; 3, 1977.
- [Amsde89.01] Amsden, A. A., O'Rourke, P. J., Butler, T. D.; KIVA-II: A computer program for chemically reactive flows with sprays, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1989.
- [Asche74.01] Aschenbach, E.; Vortex shedding from spheres; J. Fluid Mech.; 62, 1974.
- [Avila95.01] Avila, R., Cervantes, J.; Analysis of heat transfer in a turbulent particle pipe flow; Int. J. Heat Mass Transfer; 38; Nr. 11; 1995.
- [Azeve91.01] Azevedo, J. L. T., Pereira, J. C. F.; Calculation of free and confined gas-multiple size particle swirling jets; Turbulence Modification in Multiphase Flows, Vol. 110; 1991.
- [Balze95.01] Balzer, G., Boelle A. Simonin, O.; Eulerian Gas Solid Flow Modelling of dense fluidized bed; EDF report; 1995.
- [Bauer90.01] Bauer, W., Steinhardt, R.; Emissionsgrade feuerfester Baustoffe; Gaswärme International; 39; 1990.
- [Bauer99.01] Bauer, W.; Emissionsgrade von Ofenbaustoffen; BWK; 1999.

- [Berle86.01] Berlemont, A., Picart A., Gouesbet, G.; Prediction of turbulence fields and particle dispersion using the code DISCO-2.; Computational techniques for fluid flow, Recent Adv. Numer. Methods Fluids 5, 281-313.; 5, 1986.
- [Berle87.01] Berlemont, A., Gouesbet G., Desjonqueres, P.; Lagrangian simulation of particle dispersion; Lecture Notes in Engineering; Springer; Berlin; 1987.
- [Berle90.01] Berlemont, A., Desjonqueres P., Gouesbet, G.; Particle Lagrangian simulation in turbulent flows; Int. J. Multiphase Flow; 16; 1990.
- [Berle91.01] Berlemont, A., Grancher, S. M., Gouesbet, G.; On the Lagrangian simulation of turbulence influence on droplet evaporation; Int. J. Heat and Mass Transfer; 34, Nr. 11, 1991.
- [Berle95.01] Berlemont, A., Grancher, S., M., Gouesbet, G.; Heat and mass transfer coupling between vaporizing droplets and turbulence using a Lagrangian approach; Int. J. Heat and Mass Transfer; Vol 38, No. 16, 1995.
- [Berle95.02] Berlemont, A., Grancher, S., M., Gouesbet, G.; Heat and mass transfer coupling between vaporizing droplets and turbulence using a Lagrangian approach; Int. J. Heat and Mass Transfer/Int. J. Multiphase Flow; Vol. 38, No. 16, 1995.
- [Bierm68.01] Biermann, P.; Wärmestrahlung staubhaltiger Gase in Dampfkesseln; Dissertation Universität Stuttgart, 1968.
- [Bierm69.01] Biermann, P., Vortmeyer, D.; Wärmestrahlung staubhaltiger Gase; Wärme- und Stoffübertragung; 1969.
- [Bloch88.01] Bloch, A. G.; Heat transfer in steam boiler furnaces; Hemisphere; Washington, New York, London; 1988.
- [Bluhm06.01] Bluhm-Drenhaus, T., Severin, T.; Ruhr-Universität Bochum; persönliche Mitteilungen
- [Bockh85.01] Bockhorn, H., Lutz, G.; Charakterisierung verschiedener Reaktionsmodelle zur Oxidation von Kohlenstoffmonoxid in turbulenten Diffusionsflammen; Deutscher Flammentag - Verbrennung und Feuerungen; VDI, Düsseldorf; 1985.
- [Boden03.01] Bodendiek, N.; Durchführung von NO_x-Minderungsversuchen an der Ofenlinie 7 im Zementwerk der Teutonia AG, interner VDZ-Bericht, Düsseldorf, 2003.
- [Boden03.02] Bodendiek, N.; Durchführung von NO_x-Minderungsversuchen im Zementwerk Bernburg der SCHWENK Zement Bernburg GmbH & Co KG, interner VDZ-Bericht, Düsseldorf, 2003.

- [Bohne76.01] Bohnet, M.; Coal devolatilization at high temperatures; 16th Symp. (Int.) on Comb.; Comb. Inst.; 1976.
- [Bohne03.01] Bohnet, M., Triesch, O.; Influence of particles on fluid turbulence in pipe and diffuser gas-solid flow; CIT; (75) 7; 2003.
- [Bolio95.02] Bolio, E. J., Yasuna A., J., Sinclair, J. L.; Dilute turbulent gas-solid flow in risers with particle-particle interactions; AIChE J.; 41 (6), 1995.
- [Bolio95.01] Bolio, E., Sinclair, J.; Gas turbulence modulation in the pneumatic conveying of massive particles in vertical tubes; Int. J. Multiphase Flow; Vol. 21 No 6; 1995.
- [Borgh89.01] Borghi, R., Murthy, S. N. B.; Turbulent Reactive Flows; Lecture Notes in Engineering; Springer; Berlin; 1989.
- [Boule99.01] Boulet, P., Oesterlé B. Tanière, A.; Prediction of heat transfer in a turbulent gas-solid pipe flow using a two-fluid model; Particul. Sci. Technol.; 17 (4), 1999.
- [Boule00.01] Boulet, P., Moissette, S., Andreux, R., Oesterlé, B.; Test of an Eulerian-Lagrangian simulation of wall heat transfer in a gas-solid pipe flow; Int. J. Heat Fluid Flow; 21; 2000.
- [Boule02.01] Boulet, P., Moissette, S.; Influence of the particle-turbulence modulation modelling in the simulation of a non-isothermal gas-solid flow; Int. J. Heat and Mass transfer; 45; 2002.
- [Bourl02.02] Bourloutski, E. S., Bubenchikov, A. M., Starchenko, A. V.; The comparison of two approaches to numerical modelling of gas-particles turbulent flow and heat transfer in a pipe; Mechanics research communications; 29, Nr. 5; 2002.
- [Bourl02.01] Bourloutski, E., Sommerfeld, M.; Transient Euler/Lagrange Calculations of Dense Gas-Liquid-Solid-Flows in Bubble Columns with Consideration of Phase Interaction; Proceedings 10th Workshop Two-Phase-Flow Prediction; Merseburg, Germany; 2002.
- [Brack92.01] Brackbill, J. U., Kothe B., D., Zemach, C.; A continuum method for modeling surface tension; J. Computational Physics; 100; 1992.
- [Bradl82.01] Bradley, D.; Gaseous flame studies; The second int. specialists meeting of the Combustion Institute on Oxidation; Oxidation Communications; Budapest; 1982.
- [Brews84.01] Brewster, M. Q.; The optical constants of coal, char and limestone; J. Heat Transfer; Vol. 106; Nr. 4; 1984.

- [Brumm94.01] Brummel, H. G., Vortmeyer D.; Berechnung der Wärmestrahlung aus Gaskörpern mit Feststoffbeladungen. Calculation of thermal radiation from solids-laden gas bodies; CIT; 66, Nr. 3, 1994.
- [Brumm95.01] Brummel, H.; Berechnung der Temperaturstrahlung von Gas-Feststoff-Gemischen bei höheren Partikelbeladungen; Dissertation TU München; 1995.
- [Brumm06.01] Brummel, H.; Wärmestrahlung von Gas-Feststoff-Gemischen; VDI-Wärmeatlas, 10. Auflage; Abschnitt Kd; Springer; Berlin 2006.
- [Brumm90.01] Brummel, H., Kakaras, E.; Wärmestrahlungsverhalten von Gas-Feststoff-Gemischen bei niedrigen, mittleren und hohen Staubbeladungen; Wärme- und Stoffübertragung; 25, 1990.
- [Bucki81.01] Buckingham, A. C., Siekhaus, W. J.; Interaction of moderately dense particle concentrations in turbulent flow; AIAA Paper No. 81-0346; 1981.
- [Campb90.01] Campbell, C. S.; Rapid granular flows; Annu. Rev. Fluid Mech.; 22, 1990.
- [Chand72.01] Chandok, S. S., Pei, D. C. T.; Particle dynamics in solid-gas flows in a vertical pipe; Prog. Heat Mass Transfer; 6, 1972.
- [Chen85.01] Chen, C. P., Wood, P. E.; A turbulence closure model for dilute gas-particle flows; Canadian J. Chemical Engineering; 63, 1985.
- [Chen86.01] Chen, C. P.; Numerical analysis of confined recirculating gas-solid turbulent flows; ASME FED; 35, 1986.
- [Chen86.02] Chen, C. P., Wood, P. E.; Turbulence closure modelling of the dilute gas-particle axisymmetric jet; AIChE J.; 32 No.1; 1986.
- [Cheva93.01] Chevalier, C.; Entwicklung eines detaillierten Reaktionsmechanismus zur Modellierung der Verbrennungsprozesse bei Hoch- und Niedertemperaturbedingungen; Dissertation Universität Stuttgart; 1993.
- [Chrig05.01] Chrigui, M.; Eulerian-Lagrangian Approach for Modeling and Simulations of Turbulent Reactive Multi-Phase Flows under Gas Turbine Combustor Conditions; Dissertation TU Darmstadt; 2005.
- [Chrig04.01] Chrigui M.; Sadiki A.; Ahmadi G; Study of interaction in spray between evaporating droplets and turbulence using second order turbulence RANS modelling and a Lagrangian approach; Progress in Computational Fluid Dynamics; Nr. 3 - 5, 2004.

- [Coppa83.01] Coppalle, A., Vervisch, P.; The total emissivities of high-temperature flames; *Combustion and Flame*; 49, 1983.
- [Corss.63.01] Corrsin, S.; Estimates of the relations between Eulerian and Lagrangian scales in large Reynolds number turbulence; *J. Atmos. Sci.*; 20; 1963.
- [Crowe77.01] Crowe, C. T., Sharma P., M., Stock, D. E.; The particle-source-in-cell model for gas-droplet flows; *J. Fluid Engineering*; Vol. 99, 1977.
- [Crowe96.01] Crowe, C. T., Troutt R., T., Chung, J. N.; Numerical models for two-phase turbulent flows; *Annu. Rev. Fluid Mech.*; 28, 1996.
- [Crowe98.01] Crowe, C. T.; On models for turbulence in fluid-particle flows; *Proceedings of ASME FEDSM'98*; 1998.
- [Crowe98.02] Crowe, C. T., Gillandt, I.; Turbulence modulation of fluid-particle flows - A basic approach; *Proceedings 3rd ICMF, Lyon 1998*; 1998.
- [Crowe00.01] Crowe, C. T.; On models for turbulence modulation in fluid-particle flows; *Int. J. Multiphase Flow*; 26; 2000.
- [Czern52.01] Czerny, M., Genzel, L.; *Glastechn. Ber.*; 25, 1952.
- [Dash01.01] Dash, S., Halder, M., Peric, M., Som, S.; Formation of air core in nozzles with tangential entry; *Journal of Fluid Engineering*; Vol. 123, T. 4, 2001.
- [Decke99.01] Decker, S., Sommerfeld, M.; Numerische Berechnung der Konzentrationsverteilung in zweiphasigen Rührwerkströmungen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren; *Chem. Technik*; 51. Jg. Heft 5, 1999.
- [Derev85.01] Derevich, I. V., Eroshenko M., V., Zaichik, L. I.; Effect of particles on channeled turbulent flows; *Fluid Dynamcis*; 1; 1985.
- [Desjo86.01] Desjonqueres, P., Gouesbet, G., Berlemont, A., Picart, A.; Dispersion of discrete particles by continuous turbulent motions; *Phys. Fluids*; 29; 1986.
- [Dryer73.01] Dryer, F. L., Glassman, I.; High-temperature oxidation of CO and CH₄; 14th Symposium (Int.) on Combustion; The Combustion Institute; 1973.
- [Ecker37.01] Eckert, E.; Messung der Gesamtstrahlung von Wasserdampf und Kohlensäure in Mischung mit nichtstrahlenden Gasen bei Temperaturen bis 1300°C; *VDI-Forschungsheft*; 387, 1937.
- [Ecker37.02] Schmidt, E., Eckert, E.; Die Wärmestrahlung von Wasserdampf in Mischung mit nichtstrahlenden Gasen; *Forschung*; 8, 1937.

- [Edwar84.01] Edwards, D. K., Matavosian, R.; Scaling rules for total absorptivity and emissivity of gases; Journal of Heat Transfer; 06, 1984.
- [Elgho93.01] Elghobashi, S. E., Truesdell, G. C.; On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles; Phys. Fluids; 5; 1993.
- [Elgob83.02] Elgobashi, S., Abou-Arab, T.; A two-equation turbulence model for two-phase flows; Phys. Fluids A; 26; 1983.
- [Elgob83.01] Elgobashi, S. E., Launder, B. E.; Turbulent time scales and the dissipation rate of temperature variance in the thermal mixing layer; Phys. Fluids; 26 (9), 1983.
- [Elgob94.01] Elgobashi, S.; On predicting particle-laden turbulent flows; Appl. Sci. Res.; 52, 1994.
- [Field67.01] Field, M. A., Gill, D. W., Morgan, B. B., Hawksley, P.; Combustion of pulverised coal; Letherhead; 1967.
- [Flame87.01] Flament, P., Bortz, S., Weber, R.; Calcination and Sulphation Studies under controlled Conditions for direct Application to Desulphurisation of Pulverised Coal Flames, IFRF Doc. No. F 138/a/6; International Flame Research Foundation (IFRF), IJmuiden, 1987.
- [Fluen06.01] FLUENT User's Guide, Version 6; FLUENT Inc., Lebanon, NH; 2006
- [Frank93.01] Frank, T., Schade P. K., Petrak, D.; Numerical simulation and experimental investigation of gas-solid two-phase flow in a horizontal channel; Int. J. Multiphase Flow; 19, 1993.
- [Garde84.01] Gardeik, H. O., Rosemann, H., Scheuer, A.; Bildung und Abbau von NO in Zementofenanlagen; Zement-Kalk-Gips; Nr. 10, 1984.
- [Geiß01.02] Geiß, S., Sadiki, A., A., M., Dreizler, A., Janicka, J.; Investigations of turbulence modulation in turbulent particle laden flows; Z. Angew. Math. Mech.; 81, 2001.
- [Geiß01.01] Geiß, S.; Über die Turbulenzmodulation turbulenter partikelbeladener nichtreagierender Zweiphasenströmungen; Dissertation TU Darmstadt; 2001.
- [Geiss04.01] Geiss S; Dreizler A; Stojanovic Z; Chrigui M; Sadiki A; Janicka J; Investigation of turbulence modification in a non-reactive two-phase flow; Experiments in Fluids; 36, Nr. 2, 2004.
- [Genze53.01] Genzel, L.; Zur Berechnung der Strahlungsleitfähigkeit der Gläser; Glastechn. Ber.; 26, 1953.

- [Gerli05.01] Gerlinger, P.; Numerische Verbrennungssimulation; Springer; Berlin; 2005.
- [Gerst91.01] Gersten, K.; Einführung in die Strömungsmechanik; 6. Auflage; Vieweg; Braunschweig 1991.
- [Gibso71.01] Gibson, M. M., Monahan, J. A.; A simple model of radiation heat transfer from a cloud of burning particles in a confined gas stream; Int. J. Heat Mass Transfer; 14, Nr. 1, 1971.
- [Giddi00.01] Giddings, D.; Investigation into the operation of a cement works precalciner vessel; Dissertation University of Nottingham; 2000.
- [Gilla97.01] Gillandt, I., Schulze, T., Fritsching, U., Bauckhage, K.; Simultaneous measurement of continuous and dispersed phase in a two phase jet flow; Flow Measurement and Instrumentation; Vol. 8, Nr. 3/4, 1997.
- [Gilla98.01] Gillandt, I., Schulze, T., Fritsching, U., Bauckhage, K.; Simultaneous measurement of continuous and dispersed phase in a two phase jet flow; Flow Measurement and Instrumentation; Vol. 9, Nr. 1, 1998.
- [Gilla01.01] Gillandt, I., Fritsching U. Bauckhage, K.; Measurement of phase interaction in dispersed gas/particle two-phase flow; Int. J. of Multiphase flow; Vol. 27, Nr. 8, 2001.
- [Gore89.01] Gore, R. A., Crowe, C. T.; Effect of particle size on modulating turbulent intensity; Int. J. Multiphase Flow; Vol. 15; 1989.
- [Görne87.01] Görner, K., Zinser, W.; Simulation industrieller Verbrennungssysteme; CIT; 59, Nr. 11, 1987.
- [Görne88.01] Görner, K., Schnell, U., Thiele, K. S. H.; Simulation und Messungen zur Zweiphasenströmung von Kohle; Forschung in der Kraftwerkstechnik; 1988.
- [Görne90.01] Görner, K., Dietz, U.; Strahlungsaustauschrechnung mit der Monte-Carlo-Methode; CIT; 62, Nr. 1, 1990.
- [Görne91.01] Görner, K.; Technische Verbrennungssysteme; Springer; Berlin; 1991.
- [Goues84.01] Gouesbet, G., Berlemont A. Picart, A.; Dispersion of discrete particles by turbulent continuous motions; Phys. Fluids; 27, 1984.
- [Goues92.01] Gouesbet, G., Berlemont, A., Desjonqueres, P., Gréhan, G.; On modelling and measurement problems in the study of turbulent two-phase flows with particles; Proceedings of the 6th workshop on two-phase flow prediction, Erlangen, Germany, edited by M. Sommerfeld; 1992.

- [Griff95.02] Griffa, A., Owens, K., Piterbarg, L., Rozovskii, B.; Estimates of turbulence parameters from Lagrangian data using a stochastic particle model; Journal of Marine Research; Vol. 53 No. 3, 1995.
- [Griff95.01] Griffiths, J. F.; Reduced kinetic models and their application to practical combustion systems; Progress in Energy and Combustion Science; 21, 1995.
- [Günth84.01] Günther, R.; Verbrennung und Feuerungen; Springer; 1984.
- [Hamil91.01] Hamill, I. S., Malin, M. R.; Turbulence modulation due to the presence of particles; The Phoenix Journal of computational fluid dynamics and its applications; Vol. 4 Sup//2, 1991.
- [Han91.01] Han, K. S., Sung J., H., Chung, M. K.; Analysis of heat transfer in pipe carrying two-phase gas-particle suspension; Int. J. Heat Mass Transfer; 34 (1), 1991.
- [Hautm81.01] Hautman, D. J., Dryer, F. L., Glassman, I.; A multiple-step overall kinetic mechanism for the oxidation of hydrocarbons; Combustion Science and Technology; 25, 1981.
- [Hein72.01] Hein, K.; Beitrag zum Wärmeübergang in feststoffbeladenen Gasströmen technischer Staubfeuerungen; Dissertation Universität Stuttgart; 1972.
- [Hetsr89.01] Hetsroni, G.; Particles-turbulence interaction; Int. J. Multiphase Flow; 15, Nr. 5, 1989.
- [Hille05.01] Hillers, M., Severin, T., Görner, K., Scherer, V.; Prozessoptimierung für eine Vorcalcinieranlage der Zementindustrie - Modellbildung, Simulation und Validierung; VDI-Berichte, Band 1888; VDI; Düsseldorf; 2005.
- [Hille07.01] Hillers, M., Bluhm, T., Severin, T.; Simulation und Optimierung von Calcinatoren; Cement International; 5, Nr. 3/2007, 2007.
- [Hinze72.01] Hinze, J. O.; Turbulent fluid and particle interaction; Prog. Heat Mass Transfer; 6, 1972.
- [Hjelm66.01] Hjelmfelt Jr., A. T., Mockros, L. F.; Motion of discrete particles in a turbulent fluid; Appl. Sci. Res.; 16, 1966.
- [Hogan01.01] Hogan, R. C., Jeffrey, N. C.; Stokes and Reynolds number dependence of preferential particle concentration in simulated three-dimensional turbulence; Phys. Fluids; Vol. 13, No. 10, 2001.
- [Hotte70.01] Hottel, H. C.; Multiple scatter: Comparison of theory with experiment. Vielfachstreuung, Vergleich der Theorie mit dem Versuch; J. Heat Transfer; 92, Nr. 2, 1970.

- [Hotte78.01] Sarofim, A. F., Hottel, H. C.; Radiative transfer in combustion chambers: Influence of alternative fuels; 6th International Heat Transfer Conference Toronto; Hemisphere; Washington DC; 1978.
- [Howar73.01] Howard, J. B., Williams, G. C., Fine, D. H.; Kinetics of carbon monoxide oxidation in postflame gases; 14th Symposium (Int.) on Combustion; The Combustion Institute; 1973.
- [Hreny95.01] Hrenya, C. M., Bolio, E. J., Chakrabarti, D., Sinclair, J. L.; Comparison of low Reynolds number k - ϵ turbulence models in predicting fully developed pipe flow; Chem. Engng. Sci.; 50 (12), 1995.
- [Hreny97.01] Hrenya, C., Sinclair, J.; Effects of particle-phase turbulence in gas-solid flows; AIChE Journal; Vol. 43 No. 4, 1997.
- [Hwang93.01] Hwang, G. J., Shen, H. H.; Fluctuating energy equations for turbulent fluid-solid flows; Int. J. Multiphase Flow; 19, 1993.
- [Jones82.01] Jones, W. P., Whitelaw, J. H.; Calculation methods for reacting turbulent flows: A review; Combustion and Flame; 48, 1982.
- [Jones88.01] Jones, W. P., Lindstedt, R. P.; Global reaction schemes for hydrocarbon combustion; Combustion and Flame; 73, 1988.
- [Kajis02.01] Kajishima, T., Takiguchi, S.; Interaction between particle clusters and particle-induced turbulence; Int. J. of Heat and Fluid Flow; 23, 2002.
- [Karma38.01] Kármán, T. d., Howarth, L.; On the statistical theory of isotropic turbulence; Proceedings of the Royal Society; 1938.
- [Kenni97.01] Kenning, V. M., Crowe, C. T.; On the effect of particles on carrier phase turbulence in gas-particle flows; Int. J. Multiphase Flow; 23, 1997.
- [Kitag01.01] Kitagawa, A., Murai Y. Yamamoto, F.; Two-way coupling of Eulerian-Lagrangian model for dispersed multiphase flows using filtering functions; Int. J. Multiphase Flow; 27 (12), 2001.
- [Kohne94.01] Kohnen, G., Rürger M. Sommerfeld, M.; Convergence behaviour for numerical calculation by the Euler/Lagrange method for strongly coupled flows; Numerical Methods in Multiphase Flows ASME FED; FED Vol. 185, 1994.
- [Kohne97.01] Kohnen, G.; Über den Einfluß der Phasenwechselwirkungen bei turbulenten Zweiphasenströmungen und deren numerische Erfassung in der Euler-Lagrange-Betrachtungsweise; Dissertation Universität Halle-Wittenberg; 1997.

- [Kokod02.01] Kokody N G; Timanyuk V A; Measurement of small particles sizes: Inverse problem of radiation scattering theory; Kharkiv, Ukraine, 3-5 June 2002; 2002.
- [Könek83.01] Köneke, D.; Kühlung und Erhitzung von Gas/Feststoff-Strömen in Wärmeaustauschern bei höheren Temperaturen; Dissertation Universität Dortmund; 1983.
- [Kreme86.01] Kremer, H.; Grundlagen der NO_x-Entstehung und -Minderung; Gaswärme International; 1986.
- [Kulic94.01] Kulick, J. D., Fessler R., J., Eaton, J. K.; Particle response and turbulence modification in fully developed channel flow; J. Fluid Mechanics; 277, 1994.
- [Kumar87.01] Kumar S; Tien C L; Dependent scattering and absorption of radiation by small particles; The 24th Nat. ASME Heat Transfer Conf. and Exhibition; 1987.
- [Kussi02.02] Kussin, J., Sommerfeld, M.; Experimental studies on particle behaviour and turbulence modification in horizontal channel flow with different wall roughness; Experiments in Fluids; 33, 2002.
- [Kussi04.01] Kussin, J.; Experimentelle Studien zur Partikelbewegung und Turbulenzmodifikation in einem horizontalen Kanal bei unterschiedlichen Wandrauigkeiten; Dissertation Universität Halle-Wittenberg; 2004.
- [Lain99.01] Lain, S., Broder D. Sommerfeld, M.; Experimental and numerical studies of the hydrodynamics in a bubble column; Chem. Engng. Sci.; 54, 1999.
- [Lain02.02] Lain, S., Sommerfeld M. Kussin, J.; Experimental studies and modelling of four-way-coupling in particle-laden horizontal channel flow; Int. J. Heat and Fluid Flow; 23, 2002.
- [Lain02.01] Lain, S., Bröder D. Sommerfeld, M.; Modelling hydrodynamics and turbulence in a bubble column using the Euler-Lagrange procedure; Int. J. Multiphase Flow; 28, 2002.
- [Lance80.01] Lance, M., Marie, J. L., Charnay, G., Bataille, J.; Turbulence structure of co-current air-water bubbly flow; Polyphase Flow and Transport, Symposium on Polyphase Flow and Transport Technology, San Francisco; 1980.
- [Lapin94.01] Lapin, A., Lübbert, A.; Numerical simulation of the dynamics of two-phase gas-liquid flows in bubble columns; CIT; 49, 1994.
- [Lee82.01] Lee, S. L., Durst, F.; On the motion of particles in turbulent duct flows; Int. J. Multiphase Flow; 8, 1982.

- [Li01.01] Li, Y., McLaughlin, J. B., Kontomaris, K., Portela, L.; Numerical simulation of particle-laden turbulent channel flow; *Phys. Fluids*; 13, Nr. 10, 2001.
- [Liao97.01] Liao, C. M., Lin Y., W., Zhou, L. X.; Simulation of particle-fluid turbulence interaction in sudden-expansion flows; *Powder Technology*; 90, 1997.
- [Liebe00.01] Liebethuth, M.; Numerische Simulation der Trockenbraunkohleverbrennung, Interne Studie, Universität GH Essen, Lehrstuhl für Umweltverfahrenstechnik und Anlagentechnik (LUAT), Essen, 2000.
- [Liebe03.01] Liebethuth, M.; Mathematische Modellierung des Mineralansatzverhaltens disperser Brennstoffe; Dissertation Universität Duisburg-Essen; 2003.
- [Light98.01] Lightstone M. F.; Raithby, G. D.; A stochastic model of particle dispersion in a turbulent gaseous environment; *Combustion and Flame*; 113, Nr. 3, 1998.
- [Light04.01] Lightstone, M. F., Hodgson, S. M.; Turbulence Modulation in Gas-Particle-Flows: A Comparison of Selected Models; *Canadian J. Chemical Engineering*; 82, 2004.
- [Lilje90.01] Liljegren, L. M., Vlachos, N. S.; Laser velocimetry measurements in a horizontal gas-solid pipe flow; *Experiments in Fluids*; 9, 1990.
- [Lilje94.01] Liljegren, L. M.; The dissipation rate of fluctuating kinetic energy in a fluid-solid flow; *Phys. Fluids*; Vol. 6 No. 11, 1994.
- [Lilje94.02] Liljegren, L. M.; Ensemble-Averaged Equations of a Particulate Mixture; *J. Fluid Engineering*; Vol. 119 No. 2, 1997.
- [Lipin05.01] Lipinski, W., Z'Graggen, A., Steinfeld, A.; Transient radiation heat transfer within a nongray nonisothermal absorbing-emitting-scattering suspension of reacting particles undergoing shrinkage; *Numerical Heat Transfer/Part B*; 47, Nr. 5, 2005.
- [Louge91.01] Louge, M. Y., Yusof M., J., Jenkins, J. T.; The role of particle collisions in pneumatic transport; *J. Fluid Mechanics*; 231, 1991.
- [Lun97.01] Lun, C. K. K., Liu, H. S.; Numerical simulation of dilute turbulent gas-solid flows; *Int. J. Multiphase Flow*; 23 (3), 1997.
- [Maeda72.01] Maeda, M., Hishida, K., Furutani, T.; Optical measurements of local gas and particle velocity in an upward flowing dilute gas-solid suspension; Vol. 94D, 1972.

- [Maeda80.01] Maeda, M., Hishida K. Furutani, T.; Optical measurements of local gas and particle velocity in an upward flowing dilute gas-solid suspension; Polyphase Flow and Transport, Symposium on Polyphase Flow and Transport Technology, San Francisco; 1980.
- [Maeda80.02] Maeda, M., Hishida K. Furtani, T.; Velocity distribution of air-solid suspension in upward pipe flow (effect of particles on air velocity distribution); Tans. Jap. Soc. mech. Engrs. Ser B; 46, 1980.
- [Magnu76.01] Magnussen, B., Hjertager, B.; On Mathematical Models of Turbulent Combustion with special Emphasis on Soot Formation and Combustion; 16th (Int.) Symposium on Combustion; The Combustion Institute; 1976.
- [Magnu91.01] Magnussen, B.; On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow; 19th American Institute of Aeronautics and Astronautics Aerospace Science Meeting; St. Louis; 1981.
- [Marte81.01] Marteney, P. J., Kesten, A. S.; Kinetics of surface reactions in catalytic combustion; 18th Symposium (Int.) on Combustion; The Combustion Institute; 1981.
- [McLau94.01] McLaughlin, J. B.; Numerical computation of particles-turbulence interaction; Int. J. Multiphase Flow; 20, 1994.
- [Melvi79.01] Melville, W. K., Bray, K. N. C.; A model of the two-phase turbulent jet; Int. J. Heat and Mass Transfer; 22, 1979.
- [Mitch82.01] Mitchell, J. W. T. J. M.; A kinetic model of nitric oxide formation during pulverized coal combustion; AIChE Journal; 28, Nr. 2, 1982.
- [Mohr01.01] Mohr, M.; Numerische Simulation der simultanen Reaktion von Kalkstein und Kohle bei der Zementherstellung; Dissertation Ruhr-Universität Bochum; 2001.
- [Moin82.01] Moin, P., Kim, J.; Numerical investigation of turbulent channel flow; J. Fluid Mechanics; 118, 1982.
- [Moiss91.01] Moissev, S. S., Petrov, V. A., Stepanov, S. V.; Method of determining the effective absorption coefficient and diffusion coefficient of radiation in strongly scattering materials. Experiments High Temp.; 29, Nr. 3, 1991.
- [Mosta85.01] Mostafa, A. A., Elghobashi, S. E.; A two-equation turbulence model for jet flows laden with vaporizing droplets; Int. J. Multiphase Flow; 11 No. 4, 1985.

- [Mosta88.01] Mostafa, A. A., Mongia, H. C.; On the interaction of particles and turbulent fluid flow; Int. J. Heat Mass Transfer; Vol. 31 No. 10, 1988.
- [Muell98.01] Mueller, C.; Numerische Simulation industrieller Verbrennungsprozesse unter Verwendung von reaktionskinetischen Ansätzen und Wirbelzerfallsmodellen; Dissertation Ruhr-Universität Bochum; 1998.
- [Nagy70.01] Nagy, A. R., Lenoir, J. M.; Absorption and scattering of thermal radiation by a cloud of small particles; AIChE Journal; 16, Nr. 2, 2004.
- [Neubr93.01] Neubronner M; Brummel, Brummel, H. G.; Das Wärmestrahlungsverhalten von Flugaschen in Abhängigkeit von ihrer mineralischen Zusammensetzung; Forschung für die Kraftwerkstechnik; VGB-Band; 1993.
- [Neubr95.01] Neubronner, M.; Strahlungswärmeübertragung von Aschepartikeln aus Kohlefeuerungen; VDI; Düsseldorf 1995.
- [Nisiz87.01] Nisizima, S., Yoshizawa, A.; Turbulent channel and Couette flows using an anisotropic $k-\varepsilon$ model; AIAA Journal; 25, 1987.
- [Owen69.01] Owen, P.; Pneumatic transport; J. Fluid Mechanics; vol. 39, part 2, 1969.
- [Parth87.01] Parthasarathy, R. N., Faeth, G. M.; Structure of turbulent particle-laden water jet in still water; Int. J. Multiphase Flow; 13, 1987.
- [Parth90.02] Parthasarathy, R. N., Faeth, G. M.; Turbulence dispersion of particles in self-generated homogeneous turbulence; J. Fluid Mechanics; 220, 1990.
- [Parth90.01] Parthasarathy, R. N., Faeth, G. M.; Turbulence modulation in homogeneous dilute particle-laden flows; J. Fluid Mechanics; 220, 1990.
- [Plass66.01] Plass, G. N.; Mie scattering and absorption cross sections for absorbing particles; Applied Optics; 5, Nr. 2, 1965.
- [Porte02.01] Portela, L. M., Ferrand, V., Bijlard, M. J., Oliemans, V. A.; Effect of turbulence-dynamics modification on turbulence-models for particle-laden wall-bounded flows; Proceedings 10th Workshop on Two-Phase Flow Predictions, Merseburg, Germany, 2002.
- [Porte02.02] Portela, L. M., Cota, P. O. R. V. A.; Numerical study of the near-wall behaviour of particles in turbulent pipe flows; Powder Technology; Nr. 125, 2002.

- [Porte03.01] Portela, L. M., Oliemans, R. V. A.; Eulerian-Lagrangian DNS/LES of particle-turbulence interactions in wall-bounded flows; *Int. J. numerical Methods in Fluids*; 43, Nr. 9, 2003.
- [Potth94.01] Potthoff, M., Tanaka T. Tsuji, Y.; Simulation turbulenter Gas-Feststoff-Strömungen mit hohem Feststoffvolumenanteil; *CIT*; 66 Nr. 9, 1994.
- [Rizk98.01] Rizk, M. A., Elghobashi, S. E.; A two-equation turbulence model for dispersed dilute confined two-phase flows; *Int. J. Multiphase Flow*; 15, 1989.
- [Rutla70.01] Rutland, D. F., Jameson, G. J.; Theoretical prediction of the sizes of drops formed in the breakup of capillary jets; *Chemical Engineering Science*; 25, 1970.
- [Sakma00.01] Sakman, L.; Parametric study of simplex fuel nozzle internal flow and performance; *AIAA Journal*; 38, 2000.
- [Sargi93.01] Sargianos, N. P., Anagnostopoulos S., J., Bergeles, G.; Influence of particle diameter distribution on the downstream particle turbulence in a two-phase, turbulent, round jet; *Int. J. for numerical methods in fluids*; Vol. 166, 1993.
- [Sato96.01] Sato, Y., Koichi, H.; Transport process of turbulence energy in particle-laden turbulent flow; *Int. J. Heat Fluid Flow*; 17, 1996.
- [Sato98.01] Sato, Y., Deutsch, E., Simonin, O.; Direct numerical simulations of heat transfer by solid particles suspended in homogeneous isotropic turbulence; *Int. J. of Heat and Fluid Flow*; 19, Nr. 2, 1998.
- [Savol98.01] Savolainen, K., Karvinen, R.; The effects of particles on gas turbulence in a vertical upwards pipe flow; *Proceedings 3rd ICMF, Lyon 1998*; 1998.
- [Scheu87.01] Scheuer, A.; Theoretische und betriebliche Untersuchungen zur Bildung und zum Abbau von Stickstoffmonoxid in Zementdrehofenanlagen; *Beton-Verlag*; 1987.
- [Schoe00.01] Schoenwetter, M., Vortmeyer, D.; A new model for radiation heat transfer in emitting, absorbing and anisotropically scattering media based on the concept of mean beam length; *Int. J. of Thermal Sciences*; 39, Nr. 9 - 11, 2000.
- [Schre93.01] Schreck, S., Keis, S. J.; Modification of grid-generated turbulence by solid particles; *J. Fluid Mechanics*; 249, 1993.
- [Schul85.01] Schulz, W., Kremer, H.; Bildung von Stickoxiden bei der Kohlenstaubverbrennung; *BWK*; Nr. 37, 1985.

- [Sever05.01] Severin, T., Wirtz, S., Scherer, V.; Modellierung der Kohleverbrennung für die CFD-Simulation technischer Feuerungen; CIT; 77, Nr. 8, 2005.
- [Sever05.02] Severin, T., Wirtz, S., Scherer, V., Hillers, M., Görner, K.; CFD-Simulation der reaktiven Zweiphasenströmung in einer Vorcalcineranlage der Zementindustrie; CIT; 77, Nr. 8, 2005.
- [Sever05.03] Severin, T., Hillers, M., Görner, K., Scherer, V.; CFD-Simulation des Strahlungs- und Turbulenzverhaltens einer reaktiven Zweiphasenströmung in einem großindustriellen Prozess; CIT; 77, Nr. 8, 2005.
- [Shuen83.01] Shuen, J. S., Chen C.-D., Faeth, G. M.; Evaluation of a stochastic model for particle dispersion in a turbulent round jet; AIChE Journal; 29, 1983.
- [Shuen85.01] Shuen, J. S., Solomon, A. S. P., Zhang, Q. F., Faeth, G. M.; Structure of particle-laden jets; AIAA Journal; 23 No. 3, 1985.
- [Shuen86.01] Shuen, J., Solomon, A. S. P., Faeth, G. M.; Drop-turbulence interactions in a diffusion flame; AIAA Journal; 24, Nr. 1, 1986.
- [Silco89.01] Silcox, G. D. K. J. C. P. D. W.; A mathematical model for the flash calcination of dispersed CaCO_3 and Ca(OH)_2 particles; Ind. Eng. Chem. Res.; 28, Nr. 2, 1989.
- [Sincl89.01] Sinclair, J. L., Jackson, R.; Gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle interactions; AIChE Journal; 35 (9), 1989.
- [Smith82.01] Smith, T. F., Shen, Z. F., Firedman, J. N.; Evaluation of the coefficients for the weighted sum of gray gas model; J. Heat Transfer; 104, 1982.
- [Snyde71.01] Snyder, W., Lumley, J.; Some measurements of particle auto correlation functions in a turbulent fluid; J. Fluid Mechanics; 48, 1971.
- [Soete74.01] De Soete, G. G.; Overall reaction rates of NO and N_2 formation from fuel nitrogen; 15th Symposium (Int.) on Combustion; The Combustion Institute; 1974.
- [Somme90.01] Sommerfeld, M.; Numerical simulation of the particle dispersion in turbulent flow: The importance of particle lift forces and particle/wall collision models; Symposium numerical methods for multiphase flows, NY 1990, Band 91; Vol. 90, 1990.
- [Somme92.01] Sommerfeld, M.; Modelling of particle-wall collisions in confined gas-particle flows; Int. J. Multiphase Flow; 18, 1992.

- [Somme93.01] Sommerfeld, M., Qiu, H.; Characterization of particle-laden confined swirling flows by phase-doppler anemometry and numerical calculation; Int. J. Multiphase Flow; Vol. 19 No. 6, 1993.
- [Somme94.01] Kohnen, G., Sommerfeld, M.; Numerische Berechnungen von Zweiphasenströmungen unter Anwendung der Euler-Lagrange-Methode bei Berücksichtigung der Phasenwechselwirkungen; CIT; 66 Nr. 9, 1994.
- [Somme95.01] Sommerfeld, M., Qiu, H.; Particle concentration measurements by phase-Doppler anemometry in complex dispersed two-phase flows; Experiments in Fluids; 18, 1995.
- [Somme98.01] Sommerfeld, M.; Modellierung von Partikelkollisionen mit dem Euler-Lagrange-Verfahren; CIT; (70) 9, 1998.
- [Somme01.01] Sommerfeld, M.; Validation of a stochastic Lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence; Int. J. Multiphase Flow; 27, 2001.
- [Spald77.01] Spalding, D.; Development of the Eddy-Break-Up Model of Turbulent Combustion; 16th Symp. (Int.) on Combustion; The Combustion Institute; 1977
- [Squir90.01] Squires, K. D., Eaton, J. K.; Particle response and turbulence modification in isotropic turbulence; Phys. Fluids; 2, 1990.
- [Squir94.01] Squires, K. D., Eaton, J. K.; Effect of selective modification of turbulence on two-equation models for particle-laden turbulent flows; J. Fluids Eng.; 116, 1994.
- [Stapp93.01] Stapper, B.; Zum Strahlungswärmeübergang in feststoff-beladenen Systemen; VDI-Fortschrittberichte, Reihe 6; VDI; Düsseldorf; 1993.
- [Stasi93.01] Mostafa, A. A., Mongia, H. C.; Eulerian and Lagrangian predictions of turbulent evaporating sprays; AIAA paper 86-0452; 1986.
- [Stoja02.01] Stojanovic, Z., Chrigui, M., Sadiki, A., Dreizler, A., Geiß, S., Janika, J.; Experimental Investigation and Modelling of Turbulence Modification in a Dilute Two-Phase Turbulent Flow; Proceedings of the 10th workshop on two-phase flow predictions; 2002.
- [Stoja04.01] Stojanovic, Z.; Investigation of turbulent dilute non-reacting gas-solid two-phase flows; Dissertation TU Darmstadt; 2004.
- [Sun88.01] Sun, J., Chen, M. M.; A theoretical analysis of heat transfer due to particle impact; Int. J. Heat Mass Transfer; 31 (5), 1988.

- [Sunda99.01] Sundaram, S., Collins, L. R.; A numerical study of the modulation of isotropic turbulence by suspended particles; J. Fluid Mechanics; Vol. 379, 1999.
- [Takig99.01] Takiguchi, S., Kajishima T. Miyake, Y.; Numerical scheme to resolve the interaction between solid particles and fluid turbulence; JSME Int. J.; Series B, Vol. 42, Nr. 3, 1999.
- [Taylo74.01] Taylor, A. R., Middleman, S.; Turbulent dispersion in drag-reducing fluids; AIChE Journal; 20, 1974.
- [Theof82.01] Theofanous, T. G., Sullivan, J.; Turbulence in two-phase dispersed flows; J. Fluid Mechanics; 116, 1982.
- [Tries00.01] Triesch, O., Bohnet, M.; Einfluss von Partikeln auf die Fluidturbulenz einer verzögerten Gas-Feststoffströmung; CIT; 72, Nr. 8, 2000.
- [Tries01.01] Triesch, O., Bohnet, M.; Measurement and CFD prediction of velocity and concentration profiles in a decelerated gas-solid flow; Powder Technology; Vol. 115, No. 2, 2001.
- [Tsuji82.01] Tsuji, Y., Morikawa, Y.; LDV measurements of air-solid two-phase flow in a horizontal pipe; J. Fluid Mechanics; 120, 1982.
- [Tsuji84.01] Tsuji, Y., Morikawa Y. Shinomi, H.; LDV measurements of air-solid two-phase flow in a vertical pipe; J. Fluid Mechanics; 139, 1984.
- [Tsuji87.01] Tsuji, Y., Morikawa Y. Tanaka, A., Nakatsukasa N. Nakatani, M.; Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a two-dimensional horizontal channel; Int. J. Multiphase Flow; 13, 1987.
- [Tu94.01] Tu, J. Y., Fletcher, C. A. J.; An improved model for particulate turbulence modulation in confined two-phase flows; Int. Comm. Heat and Mass Transfer; Vol. 21 No. 6, 1994.
- [Varak98.01] Varaksin, A. Y., Kurosaki Y. Satoh, I.; Experimental study of the direct influence of the small particles on the carrier air turbulence intensity for pipe flow; Proceedings 3rd ICMF, Lyon 1998.
- [Varak00.01] Varaksin, A. Y., Zaichik, L. I.; Effect of particles on the carrier flow turbulence; Thermophysics and Aeromechanics; 7, 2000.
- [Vonde93.01] Vonderbank, R. S., Leithner, R., Schiewer, S., Hardow, B.; Modellierung paralleler Kalzinierung und Sulfatierung bei der SO₂-Einbindung durch das Trocken-Additiv-Verfahren; BWK; 45, Nr. 10, 1993.
- [Vortm66.03] Vortmeyer, D.; Wärmestrahlung in Schüttungen; VDI-Verlag; Düsseldorf; 1966.

- [Vortm66.02] Vortmeyer, D., Börner, B.; Die Strahlungsdurchlaßzahl in Schüttungen; CIT; 38, Nr. 10, 1966.
- [Vortm66.01] Vortmeyer, D.; Wärmestrahlung in Schüttungen; CIT; 38, Nr. 4, 1966.
- [Vortm80.01] Vortmeyer, D.; Radiation in packed solids; German Chemical Engineering; 3, 1980.
- [Walth53.01] Walther, A., Dörr, J., Eller, E.; Mathematische Berechnung der Temperaturverteilung in der Glasschmelze mit Berücksichtigung von Wärmeleitung und Wärmestrahlung; Glastechn. Ber.; 26, Nr. 5, 1953.
- [Wang04.01] Wang, F., Cen, K., Girasole, T.; Two-flux method for radiation heat transfer in anisotropic gas-particles media; Science in China Series E; 47, Nr. 6, 2004.
- [Warna01.01] Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R. W.; Verbrennung; Springer; Berlin 2001.
- [Wells83.01] Wells, M. R., Stock, D. E.; The effects of crossing trajectories on the dispersion of particles in turbulent flow; J. Fluid Mechanics; 136, 1983.
- [Westb81.01] Westbrook, C. K., Dryer, F. F.; Simplified Reaction Mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames; Comb. Sci. Techn.; 27, 1981.
- [Westb84.01] Westbrook, C. K., Dryer, F. L.; Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion; Prog. Energy Comb. Science; 10, 1984.
- [Westb00.01] Westbrook, C. K.; Chemical kinetics of hydrocarbon ignition in practical combustion systems; Proceedings of the Combustion Institute 23; The Combustion Institute; 2000.
- [Wu94.01] Wu, J. S., Faeth, G. M.; Sphere wakes at moderate Reynolds numbers in a turbulent environment; AIAA Journal; 32, 1994.
- [Yamad01.01] Yamada J; Kurosaki Y; Nagai T; Radiation heat transfer between fluidizing particles and a heat transfer surface in a fluidized bed; J. Heat Transfer; 123, Nr. 3, 2001.
- [Yamam01.01] Yamamoto, Y., Potthoff M. Tanaka, T., Kajishima T. Tsuji, Y.; Large-eddy-simulation of turbulent gas-particle flow in a vertical channel; J. Fluid Mechanics; 442, 2001.
- [Yang05.01] Yang, T. S., Shy, S. S.; Two-way interaction between solid particles and homogeneous air turbulence: Particle settling rate and turbulence modification measurements; J. Fluid Mechanics; Nr. 526, 2005.

- [Yarin94.01] Yarin, L. P., Hetsroni, G.; Turbulence intensity in dilute two-phase flows -I - III; Int. J. Multiphase Flow; 20 (1), 1994.
- [Yu00.01] Yu, M., Baek, S., Park, J.; An extension of the weighted sum of gray gases non-gray gas radiation model to a two phase mixture of non-gray gas with particles; Int. J. Heat and Mass Transfer; 43, Nr. 10, 2000.
- [Yuan92.01] Yuan, Z., Michaelides, E. E.; Turbulence modulation in particulate flows - A theoretical approach; Int. J. Multiphase Flow; 18 (5), 1992.
- [Yule00.01] Yule, A. J., Chinn, J. J.; The internal flow and exit conditions of pressure swirl atomizers; Atomization & Sprays; Vol. 10, T. 2, 2000.
- [Zhang01.01] Zhang, Y., Reese, J.; Particle-gas turbulence interactions in a kinetic theory approach to granular flows; Int. J. Multiphase Flow; 27, 2001.
- [Zhou01.01] Zhou, L. X., Chen, T.; Simulation of swirling gas-particle flows using USM and $k-\varepsilon-k_p$ two-phase turbulence models; Powder Technology; 114, 2001.
- [Zinse85.01] Zinser, W.; Zur Entwicklung mathematischer Flammenmodelle für die Verfeuerung technischer Brennstoffe; VDI-Verlag; Düsseldorf; 1985.
- [Zisse79.01] Zisselmar, R., Molerus, O.; Investigation of solid-liquid pipe flow with regard to turbulence modification; Chem. Engng. JI.; 18, 1979.

Lebenslauf

Name: Michael Hillers
Geburtsdatum/Ort: 22.12.1972 in Jülich, Kreis Düren

Schulausbildung
1983 - 1992 Helmholtz-Gymnasium, Essen

Zivildienst
1992 - 1993 Franz-Sales-Haus, Essen

Studium
1993 - 2001 Maschinenbau-Studium an der Universität GH Essen

Berufstätigkeiten
2002 International Flame Research Foundation (IFRF), Ijmuiden, NL
Angestellter am Gaswärme-Institut Essen e. V.

2003 - 2007 wissenschaftlicher Angestellter an der Universität Duisburg-Essen

seit 2007 Angestellter bei der MAN Turbo AG, Oberhausen