

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Anforderungen an die Modellierung</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Modelle der Stickoxidbildung bei der Kohleverbrennung</b>	<b>4</b>
3.1	Brennstoffstickstoff: Struktur und Freisetzung . . . . .	4
3.2	Allgemeines zum Chemismus homogener Gasphasenreaktion . . . . .	12
3.3	Homogene Stickoxidbildung . . . . .	15
3.3.1	Empirische Modelle . . . . .	15
3.3.2	Globalreaktionsmodelle . . . . .	16
3.3.3	Elementarreaktionsmodelle . . . . .	18
3.3.4	Ermittlung der Radikalkonzentrationen . . . . .	25
3.4	Feststoffkatalytische und heterogene NO-Reaktionen . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Entstehung und Einbindung von Schwefeldioxid bei der Kohleverbrennung</b>	<b>34</b>
4.1	Struktur von Schwefelverbindungen und ihre Freisetzung bei der Kohleverbrennung . . . . .	35
4.2	Kalzinierung von Kalkstein/Dolomit . . . . .	39
4.3	Modelle zur Sulfatierung . . . . .	44
4.3.1	Shrinking core Modell . . . . .	46
4.3.2	Grain Modell . . . . .	47
4.3.3	Random pore Modell . . . . .	50
<b>5</b>	<b>3-D Simulation von Strömungen mit chemischen Reaktionen</b>	<b>56</b>

5.1	Bilanzgleichungen . . . . .	56
5.2	Eingesetzte Methoden und Modelle zur Lösung der Bilanzgleichungen in CAFIRE . . . . .	58
5.3	Einzelmodelle zur Brennraumsimulation im Programm CAFIRE . . . . .	61
5.3.1	Kohleaufheizung . . . . .	62
5.3.2	Das Pyrolysemodell . . . . .	62
5.3.3	Abbrand der Flüchtigen . . . . .	63
5.3.4	Das Modell für den Koksabbrand . . . . .	63
5.3.5	Modell zur Temperaturberechnung . . . . .	64
5.4	Das Programm CAFIRE zur 3D-Simulation eines ZAWSF Brennraumes	67
5.5	Das post-processing Konzept des Programmsystems CAFIRE . . . . .	72
<b>6</b>	<b>Das <math>NO_x</math>-Kinetikmodell bei der Kohleverbrennung in einer-ZAWSF</b>	<b>77</b>
6.1	Reaktionsbedingungen für die NO-Bildung in zirkulierenden atmosphärischen Wirbelschichtfeuerungen . . . . .	77
6.2	Das gewählte Modell zur Stickstofffreisetzung aus der Kohle . . . . .	78
6.3	Rührkesseluntersuchungen zur Konversion des freigesetzten HCN . . . . .	79
6.4	Rührkesseluntersuchungen zur Stickoxidreduktion an Kokspartikeln . . . . .	90
6.5	Gesamtmodell der $NO_x$ -Entstehung und -Reduktion . . . . .	92
<b>7</b>	<b>Modell der <math>SO_2</math>-Bildung und -Einbindung bei der Kohleverbrennung in ZAWSF</b>	<b>94</b>
7.1	Freisetzung des Schwefeldioxids mit den Flüchtigen . . . . .	94
7.2	Das Modell zur Sulfatierung von CaO-Partikel . . . . .	96
<b>8</b>	<b>Die ZAWSF-Versuchsanlage 1, 2MW<sub>th</sub> Niederaußem</b>	<b>107</b>
8.1	Aufbau und Betriebsparameter der ZAWSF Niederaußem . . . . .	107
8.2	Eingesetzte Meßtechnik an der ZAWSF Versuchsanlage Niederaußem . . . . .	108

---

8.3	Betriebsparameter und Meßergebnisse der ZAWSF-Versuchsanlage . . .	110
8.3.1	Versuch 3/1-1 Rheinische Brikettierbraunkohle . . . . .	110
8.3.2	Versuch 3/1-2 Rheinische Brikettierbraunkohle . . . . .	112
8.3.3	Versuch 5/1-11 Saarländische Steinkohle . . . . .	114
8.3.4	Entschwefelungsversuche ZAWSF Niederaußem mit Rheinischer Braunkohle . . . . .	116
<b>9</b>	<b>Ergebnisse der 3-D Schadstoffsimulationen</b>	<b>125</b>
9.1	Versuch 3/1-1 Rheinische Brikettierbraunkohle . . . . .	125
9.2	Versuch 3/1-2 Rheinische Brikettierbraunkohle . . . . .	131
9.3	Versuch 5/1-11 Saarländische Steinkohle . . . . .	138
<b>10</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>142</b>
<b>11</b>	<b>Anhang</b>	<b>144</b>
<b>12</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>171</b>