

Dipl.-Ing. Hans-Christoph Magel, Engstingen

**Simulation chemischer
Reaktionskinetik in
turbulenten Flammen mit
detaillierten und globalen
Mechanismen**

Reihe **6**: Energietechnik

Nr. **377**

Inhaltsverzeichnis

Wichtige Formelzeichen	VII
1 Motivation und Zielsetzung	1
2 Numerische Strömungsberechnung	5
2.1 Erhaltungsgleichungen	5
2.2 Berechnung des mittleren Reaktionsumsatzes	8
2.3 Thermische Strahlung	11
2.4 Numerische Lösungsverfahren	11
3 Chemische Reaktionskinetik	13
3.1 Grundlagen	13
3.2 Detaillierte Reaktionsmechanismen	17
3.2.1 Detaillierter C1/C2-Mechanismus von Warnatz und Maas	20
3.2.2 C1- und Stickoxid-Basis-Mechanismus von Glarborg	21
3.2.3 Detaillierter Stickoxid-Mechanismus von Miller und Bowman	21
3.3 Globale Reaktionsmodelle der Kohlenwasserstoffoxidation	22
3.3.1 Entwurf einer globalen 3-Schritt Kinetik	27
3.4 Vergleichende Untersuchungen an einem Rührkesselreaktor	29
4 Modellierung turbulenter reaktiver Strömungen	34
4.1 Energiekaskade und Wirbelzerfall	36
4.2 Eddy Dissipation Concept (EDC)	39
4.2.1 Integration chemischer Reaktionskinetik	43
4.2.2 Quasistationaritäts-Bedingungen	45
4.2.3 Entkoppelte NO-Berechnung (Post-Prozessor)	47
4.2.4 Eddy Dissipation Modell	48
4.3 Numerische Implementierung des EDC	50
4.3.1 Detaillierte Reaktionsmechanismen	50
4.3.2 Globalmodelle	52

5	Simulationsergebnisse von Erdgasflammen	54
5.1	Unverdrallte Methan-Diffusionsflamme	54
5.1.1	Experimenteller Aufbau	54
5.1.2	Reaktionskinetische Untersuchungen mit detaillierter Chemie .	55
5.1.3	Untersuchungen zum Eddy Dissipation Concept	61
5.1.4	Berechnungen mit Globalkinetik	62
5.2	Drallstabilisierte Erdgasflamme	64
5.2.1	Experimenteller Aufbau	64
5.2.2	Ergebnisse mit detailliertem Reaktionsmechanismus	67
5.2.3	Einfluß vereinfachter Reaktionsmechanismen	75
5.2.4	Einfluß der Fine Structure-Kenngrößen	77
5.2.5	Berechnungen mit Globalkinetik	78
6	Modellierung der Kohlenstaubverbrennung	81
6.1	Reaktionsmodell der Kohlenstaubverbrennung	81
6.2	Freisetzung des Kohle-Stickstoffs	89
6.2.1	Phänomenologische Betrachtung	89
6.2.2	Detaillierte Pyrolyse-Simulation mit dem FG-DVC-Modell ...	91
6.2.3	Globalmodell der Stickstoff-Freisetzung	98
7	Brennstoffgestufte Kohlenstaubflamme	100
7.1	Experimenteller Aufbau	101
7.2	Berechnungen mit detaillierter Chemie	102
7.3	Entwurf eines globalen Reburn-NO-Modells	106
7.3.1	Reburn-NO-Modell für Kohlenstaubflammen	106
7.4	Ergebnisse mit Globalmodellen	111
8	Simulation einer Kraftwerksfeuerung	114
9	Zusammenfassung	119
	Literaturverzeichnis	123