

Engler-Bunte-Institut Teilinstitut Verbrennungstechnik (EBI-vbt)

Chemischer Gleichgewichtsrechner

Probieren Sie auf dieser Seite unser Programm für die Berechnung des thermodynamischen Gleichgewichtes einer Gasmischung
mehr ...

Kontakt

Engler-Bunte-Ring 7
76131 Karlsruhe

Gebäude 40.13.1

Tel: +49(0)721 608-42571
Fax: +49(0)721 608-47770

E-Mail: Sekretariat
Link zur Seite:



Kooperationspartner:



Bachelor- und Masterarbeiten

Aktuelle Angebote für das Anfertigen von Bachelor- und Masterarbeiten finden sie auf der folgenden Seite.
mehr ...

"Modellierung der partiellen Oxidation von Methan "

Motivation

Die Verbrennung eines Brenngases bestehend aus reinen Kohlenwasserstoffen und dem Oxidationsmittel Sauerstoff erlaubt über die Betrachtung der Stöchiometrie eine Einteilung in zwei Bereiche: Die Verbrennung von Brenngasen unterstöchiometrischer oder überstöchiometrischer Zusammensetzung. Den Grenzfall bildet dabei die Verbrennung eines Brenngases in stöchiometrischer Zusammensetzung, wobei, im Fall von reinen Kohlenwasserstoffen, die Sauerstoffmenge im Brenngas exakt ausreicht, sodass bei vollständigem Umsatz nur die Produkte Wasser und Kohlenstoffdioxid entstehen. Bei der Verbrennung eines Brenngases überstöchiometrischer Zusammensetzung ist der Sauerstoffanteil größer als im Fall stöchiometrischer Zusammensetzung und bei der Verbrennung eines Brenngases unterstöchiometrischer Zusammensetzung

Während bei der Verbrennung von Brenngasen mit überstöchiometrischer Zusammensetzung der Sauerstoffüberschuss einen vergleichsweise geringen Einfluss auf die Produktzusammensetzung zeigt, treten bei der Verbrennung von Brenngasen mit unterstöchiometrischer Zusammensetzung, neben Wasser und Kohlenstoffdioxid, nennenswerte Mengen weiterer Produkte wie Wasserstoff, Kohlenstoffmonoxid, höhere Kohlenwasserstoffe bis hin zu Feststoffen wie Ruß auf.

Bei "klassischer" Verwendung der Verbrennung zur Bereitstellung hoher Temperaturen, beispielsweise bei der Energieumwandlung, werden Brenngase in überstöchiometrischer Zusammensetzung verbrannt, da die Produkte der Verbrennung von Brenngasen unterstöchiometrischer Zusammensetzung, beispielsweise, als Schadstoffe für die Umwelt deklariert sind.

In der chemischen Industrie werden die Produkte der Verbrennung eines Brenngases mit unterstöchiometrischer Zusammensetzung als Ausgangsstoffe für die Produktion von Düngemitteln, Kunststoffen, Elektroden, Schmierstoffen, Spezialchemikalien und vielem mehr eingesetzt. Die genaue Spezieszusammensetzung der Abgase aus der Verbrennung eines Brenngases unterstöchiometrischer Zusammensetzung in Abhängigkeit der technischen Randbedingungen ist Gegenstand dieser Forschung am Institut für Verbrennungstechnik. Die numerische Simulation soll dabei als Werkzeug zur Abbildung von technischen Systemen zum Einsatz kommen, da solche Systeme nur unter hohem Aufwand experimentell untersucht werden können und in vielen Fällen keine Messtechnik zur Untersuchung unter den vorliegenden Bedingungen existiert.

Die partielle Oxidation

Die Verbrennung eines Brenngases mit unterstöchiometrischer Zusammensetzung wird aufgrund der anteiligen chemischen Umsetzung des Brennstoffes zu Wasser und Kohlenstoffdioxid auch als partielle Oxidation bezeichnet. Es wird zwischen zwei technischen Verfahren zur partiellen Oxidation unterschieden: Der katalytischen partiellen Oxidation und der thermischen partiellen Oxidation. Bei der katalytischen partiellen Oxidation wird das Brenngas in Kontakt mit einem Katalysator gebracht, wodurch die Reaktion zu den jeweiligen Produkten energetisch begünstigt wird und daher bei niedrigen Temperaturen mit hoher Selektivität abläuft. Bei der thermischen Oxidation unter autothermen Bedingungen bildet sich eine Flamme aus. Diese Flamme unterscheidet sich in ihrer Struktur signifikant von einer Flamme bei der ein Brenngas mit überstöchiometrischer Zusammensetzung verbrannt wird.

Methodik

Eine Möglichkeit zur Simulation turbulenter vorgemischter technischer Verbrennungssysteme zur partiellen Oxidation besteht in der Anwendung einer CFD-Simulation. Dabei werden partielle Differentialgleichungen welche den Transport diverser Modellgrößen beschreiben numerisch gelöst. Die Komplexität solcher Simulationen hängt einerseits von der geometrischen Dimension des betrachteten Rechengebietes und der angestrebten oder erforderlichen Auflösung ab, und andererseits von der Anzahl der zu lösenden Differentialgleichungen sowie deren Abhängigkeiten untereinander.

Bei der fluiddynamischen Simulation eines mehrdimensionalen Rechengebietes werden für die Beschreibung des Impulstransportes die Navier-Stokes-Gleichungen gelöst. Beim Auftreten turbulenter Strömungen sind die auftretenden Turbulenzelemente aufzulösen oder teilweise bzw. vollständig über Modelle zu beschreiben. Wenn das durchströmende Medium, bei den im Rechengebiet auftretenden Druckänderungen, kompressible Effekte aufweist, oder sich die Dichte durch beispielsweise chemische Reaktionen ändert wird eine weitere partielle Differentialgleichung für die Enthalpie oder innere Energie gelöst. Im Falle der chemischen Reaktion werden für die jeweiligen Transportgleichungen der Spezies entsprechend ihrer Anzahl gelöst. Die Quellterme dieser Spezieserhaltungsgleichungen sind über die chemischen Reaktionen der Spezies untereinander gekoppelt. Das hat zur Folge, dass neben den Transporttermen ein gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem zu lösen ist. Bei der überstöchiometrischen Verbrennung von Methan werden, beispielsweise im detaillierten GRI3.0 Mechanismus, 53 Spezies betrachtet. Diese Spezies sind über 325 Reaktionen untereinander gekoppelt. Dieser Umstand führt zur Notwendigkeit der Reduktion des Reaktionssystemes, bei gleichzeitiger Erhaltung der Informationen über die Modellgrößen welche im Fokus der Simulation stehen.

Die in dieser Forschungsarbeit angewendete Methode basiert auf der Reduktion der Spezieserhaltungsgleichungen auf eine für die Reaktion charakteristische Fortschrittsvariable und einen die Zusammensetzung beschreibenden Mischungsbruch. Für diese Größen wird dann jeweils eine partielle Differentialgleichung, welche den Transport der jeweiligen Größe beschreibt, gelöst. Der Quellterm der Transportgleichung für die Fortschrittsvariable wird, bei dem zur Anwendung kommenden Modell, einer

Fortschrittsvariable und Mischungsbruch, die Zusammensetzung, thermophysikalische Daten sowie der Quellterm der Fortschrittsvariablen gespeichert. Zur Erstellung einer solchen Tabelle wird das Reaktormodell einer adiabaten laminaren eindimensionalen Vormischflamme, unter Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus für verschiedene Mischungsbrüche gelöst. Die berechneten Reaktionsverläufe werden über einer definierten Fortschrittsvariable aufgetragen und die Quellterme berechnet. Um den Einfluss der Turbulenz auf die Reaktion abzubilden wird diese Tabelle unter der Verwendung einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion integriert.

Ziele

Das Ziel dieser Forschungsarbeit ist die Simulation turbulenter vorgemischter technischer Verbrennungssysteme zur partiellen Oxidation. Dafür werden die folgenden Schritte unternommen:

- Identifikation eines geeigneten Reaktionsmechanismus zur Beschreibung der laminaren Vormischflamme im Bereich der partiellen Oxidation
 - Recherche unterschiedlicher Reaktionsmechanismen und Berechnung der laminaren Flammengeschwindigkeit
 - Messung der laminaren Flammengeschwindigkeit als Validierungsparameter
 - Bestimmung einer geeigneten eindeutigen Fortschrittsvariablen als Reaktionsfortschritt
 - Tabellierung laminarer Vormischflammen und Integration mit einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
 - Berechnung der isothermen Strömungsfelder eines technischen Systems
 - Berechnung der reaktiven adiabaten Strömungsfelder
-

©

[IMAGE]
Update Page

Nach oben
KIT - Die Forschungsuniversität in der Helmholtz-Gemeinschaft

- Heruntergeladen am Sat Oct 31 03:19:50 CET 2020 ; eine aktuelle Version finden Sie unter: