

Verbrennung von Mischungen aus Anthrazit- und Braunkohle

Von der Fakultät für Energie-, Verfahrens- und Biotechnik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von
Kamil Marcak
aus Tarnowitz

Hauptberichter: Prof. Dr. techn. Günter Scheffknecht

Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. habil. Klaus Görner, Universität Duisburg-Essen

Tag der mündlichen Prüfung: 20.Dezember 2022

Institut für Feuerungs- und Kraftwerkstechnik
der Universität Stuttgart

2023

Danksagung und Vorwort

„Du hast'n Pulsschlag aus Stahl.“

Herbert Grönemeyer

Die Aufgabenstellung und der Beginn der vorliegenden Arbeit entstanden im Rahmen meiner Tätigkeit als Projektingenieur bei der RWE Technology. Für diese Möglichkeit bin ich dem Unternehmen zu Dank verpflichtet. Der überwiegende Teil dieser Arbeit bis hin zum erfolgreichen Abschluss erfolgte berufsbegleitend.

Ein besonderer Dank gilt Herrn Univ.-Prof. Dr. techn. Günter Scheffknecht für die Übernahme des Hauptberichts und die gute Betreuung sowie Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Klaus Görner für die Übernahme des Mitberichts. Ebenfalls danken möchte ich Herrn apl. Prof. Dr.-Ing. Uwe Schnell für die intensive Begleitung und die zahlreichen fachlichen Diskussionen.

Herzlich danken möchte ich vor allem meinen lieben Eltern, die mich mit einer schier unendlichen Geduld sowohl bei der Erstellung dieser Arbeit als auch in meiner persönlichen Weiterentwicklung sehr unterstützen. Auch meiner Frau Patricia, meiner Familie und meinen Freunden gilt ein besonderer Dank für ihr Verständnis, zahlreiche Stunden meiner Freizeit in das Erstellen einer Arbeit zu investieren, auf die ich sehr stolz bin. Neben der Erfüllung der Aufgabenstellung konnte ich mein persönliches Anliegen umsetzen, dass die deduktive Vorgehensweise bei der Erstellung der Arbeit sich im Text widerspiegelt: Die allem zugrundeliegende Modellierung in der Detailtiefe der molekularen Bewegung wird sukzessive erweitert, um letztlich den Zustand eines komplexen technischen Prozesses zu berechnen.

„Und der Mensch heißt Mensch,
weil er vergisst, weil er verdrängt,
weil er irrt und weil er kämpft,
und weil er schwärmt und glaubt,
sich anlehnt und vertraut,
und weil er hofft und liebt,
weil er mitfühlt und vergibt.“

Herbert Grönemeyer

Inhaltsverzeichnis

Danksagung und Vorwort	III
Inhaltsverzeichnis	VII
Nomenklatur	IX
Kurzfassung	XVI
Abstract	XVIII
1 Aufgabenstellung	1
2 Stand des Wissens	4
2.1 Allgemeiner Kohlenstaubverbrennungsprozess	4
2.2 Wesentliche Aufbau- und Betriebsmerkmale der Feuerung Ibbenbüren	6
3 Modellierung des allgemeinen Kohlenstaubverbrennungsprozesses	9
3.1 Prozessabstraktion in der Detailtiefe der Molekularbewegung	9
3.1.1 Physikalische Grundlagen	9
3.1.2 Eigentliche Prozessabstraktion	10
3.2 Prozessabstraktion in der Detailtiefe der Strömungsbewegung	13
3.2.1 Ableitung der Bilanzgleichungen der exakten Strömungsbewegung	13
3.2.2 Vereinfachung der Bilanzgleichungen der exakten Strömungsbewegung	20
3.3 Modellierung nicht anwendungsspezifischer Prozessmerkmale	24
3.3.1 Stoffverhalten	24
3.3.2 Strömungsverhalten	31
3.3.3 Strahlungsverhalten	36
3.3.4 Umwandlungsverhalten	41
3.4 Resultierende Bilanzgleichungen	55

4	Modellierung anwendungsspezifischer Prozessmerkmale	56
4.1	Simulationsraum	56
4.2	Massenstrom und Zustand der eintretenden Ströme	57
4.3	Stoffverhalten	60
4.4	Strahlungsverhalten	61
4.5	Umwandlungsverhalten	64
5	Aufbereitung und Berechnung des Gleichungssystems	67
5.1	Unterteilung des Simulationsraumes in nicht überlagerte Kontrollvolumina	67
5.2	Umformung der für jedes Kontrollvolumen aufgestellten Bilanzgleichungen	68
5.3	Approximation von Größen an den Rändern der Kontrollvolumina	70
5.4	Lösung des Gleichungssystems	72
6	Simulationsergebnisse	74
6.1	Festlegung unbekannter, anwendungsspezifischer Prozessmerkmale	74
6.2	Validierung der Vorgehensweise zur Simulation	78
6.3	Erörterung des Zünd- und Abbrandverhaltens	85
7	Zusammenfassung und Ausblick	90
	Literaturverzeichnis	95
	Anhang	108
A	Ableitung der Bilanzgleichungen der exakten Strömungsbewegung	109
A.1	Wiederkehrende Umformungen	109
A.2	Umformung der Bilanzgleichungen	123
B	Vereinfachung der Bilanzgleichungen der exakten Strömungsbewegung	134
B.1	Folgerungen einer Vereinfachung der Partikelbewegung	134
B.2	Umformung der Bilanzgleichungen	135
C	Feuerungsunabhängige Stoffwerte	142
D	Bestimmtheit der Energiebilanz des Gesamtprozesses	148
E	Emissionsgrad der Gasphase	149
F	Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse	151
	Lebenslauf	154

Nomenklatur

Symbole lateinische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bedeutung
A	m^2	Fläche
a	m^2/kg	massenspezifische äußere Partikeloberfläche
B_{CA}	–	Ausbrandwert
c	$J/(kg\ K)$	integrale massenspezifische Wärmekapazität
c	m/s	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum
C	$J/(kg\ K)$	differentielle massenspezifische Wärmekapazität
C	<i>var.</i>	Konstante, Hilfsgröße
D	m^2/s	Diffusionskoeffizient
D	m	Durchmesser
e_{chem}, e_{chem}	J/kg	chemische Energie
e_{iB}, e_{iB}	J/kg	Energie der inneren Bewegungen
E_A	J/mol	Aktivierungsenergie eines Arrheniusansatzes
f, f	m/s^2	Phasenwechselbeschleunigung
g	m/s^2	Erdbeschleunigung 9,80665
G	$kg/(m\ s^3)$	Turbulenzproduktion
h_{Pl}	$J\ s$	Planck-Konstante $6,62607 \cdot 10^{-34}$
Δh_{Rea}	J/kg	Reaktionsenthalpie
H_u	J/kg	Heizwert im Referenzzustand
I	$W/(m^2\ sr)$	Strahlungsintensität
j	$kg/(m^2\ s)$	Massendiffusionsstromdichte
k	$1/m$	spektraler Koeffizient
k	J/kg	Turbulenzenergie
k_0	<i>var</i>	Frequenzfaktor eines Arrheniusansatzes
k_{Bo}	J/K	Boltzmann-Konstante $1,38062 \cdot 10^{23}$

L	m	Mischungsweg
\mathbf{L}, L	$W/(m^3 \text{ sr})$	spektrale Strahlungsdichte
M_M	kg/mol	molare Masse
\dot{m}_{Rea}	$kg/(m^3 \text{ s})$	Reaktionsgeschwindigkeit
n_{Abd}	–	Ausbrandparameter
Nu	–	Nusseltzahl
Pr	–	Prandtlzahl
p	N/m^2	Druck
Q	–	relativer Wirkungsquerschnitt
\dot{Q}	W	Feuerungswärmeleistung
\dot{q}	W/m^2	Wärmestromdichte
R	<i>var.</i>	Geschwindigkeitskonstante
R	–	Rückstand
\tilde{R}	$J/(mol \text{ K})$	universelle Gaskonstante 8,314
Sc	–	Schmidtzahl
Sh	–	Sherwoodzahl
S_{chem}	W/m^3	Chemischer Quellterm
\mathbf{S}_M, S_M	$kg/(m^3 \text{ s})$	Massenquellterm
$\mathbf{S}_{Str}, S_{Str}$	W/m^3	auf Wärmestrahlung beruhender Energiequellterm
t	s	Zeit
T	K	Temperatur
\mathbf{u}, u	m/s	Geschwindigkeit der Translation
\mathbf{U}, U	J/kg	innere Energie
ΔU_{Rea}	J/kg	Reaktionsenergie
ΔU_{th}	J/kg	thermischer Anteil der Änderung der inneren Energie
V	m^3	Volumen
X	m, s	zeit-räumliche Stelle
X^{Tu}	m	Skala der Turbulenz
X^{Wb}	m	Skala der Wärmebewegung
\mathbf{x}, x	kg/kg	Massenanteil
x	m	Raumrichtung

Symbole griechische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bedeutung
α	$W/(m^2 K)$	Wärmeübergangskoeffizient
β	$kg/(m^2 s)$	Stoffübergangskoeffizient
γ_{FS}	–	Masseanteil der Fine Structures
Γ	–	Richtungskosinus
δ	m	gleichwertige Schichtdicke
ε	m^2/s^3	Dissipation
ε	–	Emissionsgrad
$\Delta\varepsilon$	–	Bandenüberlappung
ϑ	$^{\circ}C$	Temperatur
κ	–	Isentropenexponent
λ	$W/(m K)$	Wärmeleitfähigkeit
λ	m	Wellenlänge
μ	$kg/(m s)$	dynamische Viskosität
ν	m^2/s	kinematische Viskosität
ν	–	stöchiometrischer Koeffizient
ρ, ρ	kg/m^3	Dichte
σ	–	Kennzahl
σ	N/m^2	Spannung
σ	$W/(m^2 K^4)$	Stefan-Boltzmann-Konstante $5,67051 \cdot 10^{-8}$
τ	N/m^2	Schubspannung
τ_{FS}	s	Verweildauer in den Fine Structures
ϕ	–	allgemeine Bilanzgröße
φ	–	relative Feuchtigkeit
Φ, Φ	–	allgemeine Größe
Φ	–	Phasenfunktion
Ω	sr	Raumwinkel

Tiefgestellte Indizes lateinische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bedeutung
<i>A</i>	–	Asche
<i>A_p</i>	–	Asche der Klasse <i>p</i>
<i>abs</i>	–	Absorption
<i>b</i>	–	Bestandteil der Suspension (siehe Tabelle 3.1 und Tabelle 3.2)
<i>C_p</i>	–	Substanz, aus der mineralstofffr. Koks der Klasse <i>p</i> entsteht
<i>CH₄</i>	–	Methan
<i>CO</i>	–	Kohlenstoffmonoxid
<i>CO₂</i>	–	Kohlenstoffdioxid
<i>c</i>	–	Wärmekapazität
<i>D</i>	–	Durchmesser
<i>ems</i>	–	Emission
<i>FB</i>	–	Flüchtige Bestandteile
<i>F_s</i>	–	Fine Structure
<i>G</i>	–	Gasphase, Masse der Gasphase
<i>G_{gf}</i>	–	Gleichgewichtsfeuchte
<i>G_s</i>	–	Partikelgrenzschicht
<i>H₂</i>	–	Wasserstoff
<i>H₂O</i>	–	Wasser
<i>IA_k</i>	–	Ibbenbürener Anthrazitkohle
<i>i</i>	–	Koordinatenrichtung (1, 2, 3)
<i>j</i>	–	Koordinatenrichtung (1, 2, 3)
<i>KL_p</i>	–	Kohle der Klasse <i>p</i>
<i>KV</i>	–	Kontrollvolumen
<i>k</i>	–	Koordinatenrichtung (1, 2, 3)
<i>k</i>	–	Turbulenzenergie
<i>konv</i>	–	Konvektion
<i>korr</i>	–	Korrektur
<i>leit</i>	–	Leitung
<i>m</i>	–	Raumwinkel (siehe Unterkapitel 5.2)
<i>max</i>	–	maximal
<i>mfKL_p</i>	–	mineralstofffreie Kohlesubstanz der Klasse <i>p</i>

<i>mwfKL_p</i>	–	mineralstoff- und wasserfreie Kohlesubstanz der Klasse <i>p</i>
<i>mfKK_p</i>	–	mineralstofffreie Kokssubstanz der Klasse <i>p</i>
<i>N₂</i>	–	Stickstoff
<i>O₂</i>	–	Sauerstoff
<i>P</i>	–	Partikelphase, Partikel, Masse der Partikelphase
<i>PIA</i>	–	Primärgas aus Ibbenbürener Anthrazitkohle
<i>PRB</i>	–	Primärgas aus Rheinischer Braunkohle
<i>Ph</i>	–	Spezifikation auf eine Phase (<i>G</i> oder <i>P</i>)
<i>p</i>	–	Partikelklasse (siehe Unterkapitel 4.2)
<i>RBk</i>	–	Rheinische Braunkohle
<i>RU</i>	–	Ruß
<i>r</i>	–	Bruttoreaktion (siehe Tabelle 3.11)
<i>ref</i>	–	im Referenzzustand
<i>rfl</i>	–	Reflexion
<i>rstr</i>	–	Rückwärtsstreuung
<i>SO₂</i>	–	Schwefeldioxid
<i>Sätt</i>	–	Sättigungsdampfdruck von Wasser
<i>TS</i>	–	Teerstoffe
<i>wfKL_p</i>	–	wasserfreie Kohlesubstanz der Klasse <i>p</i>
<i>x</i>	–	Raumrichtung
<i>0_p</i>	–	Trocknung der mineralstofffreien Kohlesubstanz der Klasse <i>p</i>
<i>I_p</i>	–	Primärpyrolyse der mineralstoff- und wasserfreien Kohlesubstanz der Klasse <i>p</i>
<i>II_p</i>	–	Umwandlung der mineralstofffreien Kokssubstanz der Klasse <i>p</i>
<i>III</i>	–	Abbrand von Methan
<i>IV</i>	–	Abbrand von Kohlenstoffmonoxid
<i>V</i>	–	Abbrand von Wasserstoff
<i>VI</i>	–	Abbrand von Teerstoffen
<i>VII</i>	–	Sekundärpyrolyse von Teerstoffen im Hochtemperaturbereich
<i>VIII</i>	–	Abbrand von Ruß
<i>IX</i>	–	Sekundärpyrolyse von Teerstoffen im Niedertemperaturbereich

Tiefgestellte Indizes griechische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bedeutung
ε	–	Dissipation
λ	m	Wellenlänge (0,1 - 1000 μm)
ϕ	–	allgemeine spezifische Bilanzgröße

Hochgestellte Indizes lateinische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bedeutung
A_p	–	an der äußeren Oberfläche der Partikel der Klasse p
Bew	–	Bewegungsinduziert
eff	–	effektiv
G	–	Anteil der Gasphase
Ggw	–	im Gleichgewichtszustand
ig	–	Stoffwert eines idealen Gases
$krit$	–	im kritischen Zustand
M	–	materialspezifische Größe
MP	–	im Mittelpunkt eines Kontrollvolumens
max	–	maximal
mit	–	massengemittelt
min	–	minimal
P	–	Anteil der Partikelphase, Partikel
p_0	–	Druck von 1 bar
psd	–	Pseudo
Sat	–	im Sattdampfzustand
Sb	–	Strömungsbewegung
Tu	–	Turbulenz, turbulenzinduziert, Wirbelstoffwert
Umw	–	umwandlungsinduziert
v	–	isochore Zustandsänderung
Wb	–	Wärmebewegung, wärmeinduziert
0	–	Anfangszustand
$+i$	–	Kontrollvolumenrand in positiver Koordinatenrichtung i
$-i$	–	Kontrollvolumenrand in negativer Koordinatenrichtung i

Hochgestellte Indizes griechische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bedeutung
ε	–	Emissionsgrad

Abkürzungen

Symbol	Bedeutung
A_p	Asche der Klasse p
Bre.	Brenner
CH_4	Methan
CO	Kohlenstoffmonoxid
CO_2	Kohlenstoffdioxid
FWL	Feuerungswärmeleistung
H_2	Wasserstoff
H_2O	Wasserdampf
KL_p	Kohle der Klasse p
$mfKK_p$	mineralstofffreier Koks der Klasse p
$mfKL_p$	mineralstofffreie Kohle der Klasse p
$mwfKL_p$	mineralstoff- und wasserfreie Kohle der Klasse p
N_2	Stickstoff
O_2	Sauerstoff
RU	Ruß
SIMPLEC	Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations Consistent
SO_2	Schwefeldioxid
TS	Teerstoffe
waf	wasser- und aschefrei

Kurzfassung

Die RWE Generation SE betreibt in Ibbenbüren unter zunehmend schwierigeren wirtschaftlichen Randbedingungen ein Kohlekraftwerk. Möglicherweise kann zur Erhöhung des Deckungsbeitrags ein Teil der betriebsüblich eingesetzten Ibbenbürener Anthrazikohle durch Rheinische Rohbraunkohle substituiert werden. Beide Kohlen unterscheiden sich in der Ausprägung eines grundsätzlich gleichen Aufbaus aller Kohlen, was sich auf verschiedene Weise auf den Verbrennungsprozess auswirken kann. Die Aufgabe dieser Arbeit besteht darin, auf Grundlage entsprechender numerischer Strömungssimulationen zu erörtern, inwiefern entsprechende Kohlemischungen mit einem Feuerungswärmeanteil der Rheinischen Braunkohle von bis zu 40% im Dampferzeuger des Kraftwerks Ibbenbüren zünden und abbrennen würden. Die Strömungssimulationen erfolgen mittels einer entsprechenden Weiterentwicklung von AIOLOS, eines am Institut für Feuerungs- und Kraftwerkstechnik der Universität Stuttgart eigens zur Simulation von Kohlenstaubverbrennungsprozessen entwickelten Rechencodes. (siehe Kapitel 1)

Zur Führung des Verbrennungsprozesses dient im Kraftwerk Ibbenbüren eine Schmelzfeuerung. Diese umfasst unter anderem acht Walzenschüsselmühlen, in denen die Kohle simultan gemahlen und getrocknet wird, ehe sie über entsprechende Brenner in zwei Feuerräume eintritt. In den Feuerräumen bewirken die Vermischung des Kohlenstaub-Trägergas-Gemisches mit Rauchgas und der Strahlungswärmeaustausch die Umwandlung der Kohle. Hierbei entweichen zunächst adsorptiv gebundene Gase. Im weiteren Verlauf wandelt sich die feste Kohle, wobei verschiedene Gase entstehen, und Verbrennungsprozesse setzen ein. Die Rauchgase beider Feuerräume strömen in einen gemeinsamen Strahlungsraum, an dessen Ende die Konvektivheizflächen beginnen. (siehe Kapitel 2)

Die erstellten Strömungssimulationen basieren auf der Modellierung des allgemeinen Kohlenstaubverbrennungsprozesses. Dieser Prozess ist in der Detailtiefe der molekularen Bewegung durch jeweils eine Bilanzgleichung für die Masse eines Bestandteils, den Impuls jeder Phase, die gesamte Energie jeder Phase und die Änderung der spektralen Strahlungsdichte beschrieben. Aus diesem Gleichungssystem ist die Prozessbeschreibung in der geringeren Detailtiefe der Strömungsbewegung abgeleitet, was unter anderem eine Modellierung verschiedener, unbekannter Terme beinhaltet. (siehe Kapitel 3)

Die Modellierung des allgemeinen Kohlenstaubverbrennungsprozesses führt zu einem unterbestimmten Gleichungssystem. Dessen Schließung erfolgt mittels einer Modellierung verschiedener anwendungsspezifischer Prozessmerkmale. Hierzu zählen Randbedingungen betreffend die Ausprägung des Simulationsraumes und den Zustand der eintretenden Stoffströme wie auch Eigenschaften, die das Stoff-, Strahlungs- und Umwandlungsverhalten beschreiben. (siehe Kapitel 4)

Das resultierende Gleichungssystem ist analytisch nicht lösbar. Eine entsprechende Aufbereitung des Gleichungssystems ermöglicht die Berechnung einer Näherung des Prozesszustandes an diskreten Stellen. Die Aufbereitung umfasst die Unterteilung des Simulationsraumes in Kontrollvolumina, die Umformung der für jedes Kontrollvolumen aufgestellten Bilanzgleichungen und die Approximation von Größen an den Rändern der Kontrollvolumina. (siehe Kapitel 5)

Die Ausprägung von zwei anwendungsspezifischen Prozessmerkmalen ist nicht bekannt, weswegen ihre Festlegung auf einer entsprechenden Sensitivitätsanalyse basiert. Aufgrund dieser und weiterer Vereinfachungen ist die gesamte Vorgehensweise mit dem Ergebnis validiert, dass der Einfluss einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle auf das Zünd- und Abbrandverhalten zuverlässig analysiert werden kann. Die Analyse zeigt, dass die Struktur und Lage der Flammen sich nur unwesentlich ändern, während die Wärmeaufnahme der Feuerraumwände zurückgeht. So sinkt die Wärmeaufnahme der Feuerraumwände um 12% bei einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle mit einem Feuerungswärmeanteil von 40%. Der Glühverlust am Strahlungsraumende steigt bei Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle geringfügig an. Eine Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle mit einem Feuerungswärmeanteil von bis zu 40% ist aus feuerungstechnischer Sicht unbedenklich, doch ist die Beeinflussung des Produktionsbetriebes insbesondere durch die sich ändernden Wärmeaufnahmen der verschiedenen Heizflächen näher zu erörtern. (siehe Kapitel 6)

Abstract

The RWE Generation SE operates a coal-fired power plant in Ibbenbüren under increasingly difficult economic conditions. Possibly, in order to increase the contribution margin, a part of the normal used anthracite from Ibbenbüren can be substituted by Rhenish lignite. Both coals differ in the form of a basically identical structure of all coals, which can affect the combustion process in different ways. The task of this thesis is to discuss, on the basis of corresponding numerical flow simulations, how the corresponding coal mixtures in the steam generator of the power plant in Ibbenbüren would ignite and burn off. The flow simulations are made by means of a relevant evolution of AIOLOS, a computer code specially developed for the simulation of pulverized coal combustion processes at the Institute of Combustion and Power Plant Technology of the University of Stuttgart. (see chapter 1)

In the power plant in Ibbenbüren a slag-tap furnace is installed to handle the combustion process. This includes, inter alia, eight vertical roller mills in which the coal is ground and dried simultaneously before it enters two combustion chambers via respective burners. In the combustion chambers the conversion of the coal is induced by the mixing of the coal dust-carrier gas mixture with flue gas and the radiant heat exchange. At first, adsorptively bound gases escape. Then the solid particle structure changes and combustion processes begin. The flue gases flow from the combustion chambers into a common radiation section. At the end of the radiation space the convective heating surfaces are installed. (see chapter 2)

The flow simulations created are based on the modeling of the general coal dust combustion process. This process is described in the depth of detail of the molecular motion through a balance equation for the mass of a component, the momentum of each phase, the total energy of each phase and the change of the spectral radiation. From this process description the process description is derived in the lesser depth of detail of the flow movement, which among other things includes a modeling of different unknown terms. (see chapter 3)

The modeling of the general pulverized coal combustion process leads to a under-determined system of equations. Its closure takes place by means of the modeling of various application-specific process

features. These include boundary conditions regarding the design of the simulation space and the state of the incoming material flows as well as properties that describe the substance, radiation and conversion behavior. (see chapter 4)

The resulting system of equations cannot be solved analytically. A corresponding preparation of the equation system makes it possible to calculate an approximation of the process state at discrete positions. The processing includes the subdivision of the simulation space in control volumes, the transformation of the balance equations established for each control volume and the approximation of quantities at the boundaries of the control volumes. (see chapter 5)

The characteristics of two application-specific process features are not known, why their determination is based on a corresponding sensitivity analysis. Due to these and other simplifications, the entire procedure is validated with the result that the influence of co-firing of Rhenish lignite on the ignition and combustion behaviour can be reliably analysed. The analysis shows that the structure and position of the flames only change insignificantly due to the lower heat absorption of the combustion chamber walls. The loss on ignition at the end of the radiation space increases slightly when Rhenish lignite is co-fired. Co-firing of Rhenish lignite with a proportion of rated thermal input of up to 40% is harmless, but the influence on production operations, in particular due to the changed heat absorption of the various heating surfaces, needs to be discussed in more detail. (see chapter 6)

1 Aufgabenstellung

Die RWE Generation SE betreibt in Ibbenbüren ein Kohlekraftwerk. Als Brennstoff dient im Wesentlichen die in der unmittelbar angrenzenden Zeche gewonnene Anthrazitkohle, für die die Anlage ausgelegt wurde. Im Bestreben nach einem höheren Deckungsbeitrag wird überlegt, einen Teil der Ibbenbürener Anthrazitkohle durch Rheinische Braunkohle zu substituieren. Hierzu soll auf dem Bekohlungsweg dem Gesamtmassenstrom an Ibbenbürener Anthrazitkohle Rheinische Braunkohle gleichmäßig zugemischt und sowohl die installierte Anlagentechnik als auch die gegenwärtige Betriebsweise beibehalten werden.

Die genannten Kohlen haben wie die Kohlen aller Lagerstätten einen grundsätzlich gleichen Aufbau, der lagerstättenspezifisch unterschiedlich ausgeprägt ist. So besteht Kohle aus einer festen, porösen Struktur [1], in der vor allem Wasser adsorbiert ist. Die feste Struktur setzt sich überwiegend aus aromatischen und aliphatischen Kohlenwasserstoffverbindungen und verschiedenen Mineralien zusammen. Der Anteil und die Größe der aromatischen Strukturen sind tendenziell größer, je höher inkohlt eine Kohle ist [2]. Die chemische Struktur von Kohle und eine damit zusammenhängende Einteilung von Kohle in verschiedene Sorten ist durch die nachstehende Abbildung veranschaulicht.

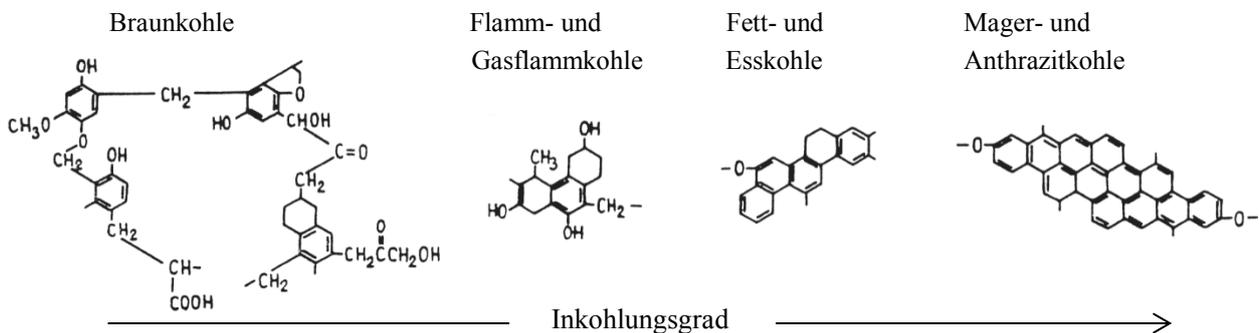


Abbildung 1-1: Chemische Struktur von Kohle [2] und Einteilung in Kohlesorten [3]

Ein aromatreicherer Aufbau spiegelt sich in einer tendenziell weniger porösen Struktur und einem kleineren Anteil adsorbierten Wassers wider. Der Anteil weiterer Gase, die bei entsprechender Erwärmung aus Kohle hervorgehen, sinkt tendenziell mit steigendem Inkohlungsgrad. Diese Gase

entstehen nämlich vermehrt aus aliphatischen Strukturen, während Aromate erhalten bleiben und erst durch Verbrennungsreaktionen aufgebrochen werden. Die Tendenz eines größeren Aromatenanteils und eines geringeren Wassergehaltes äußert sich zudem in einem tendenziell höheren Heizwert. Zur Quantifizierung des Unterschieds zwischen Ibbenbürener Anthrazitkohle und Rheinischer Braunkohle sind in der folgenden Tabelle ausgewählte Eigenschaften beider Kohlen gegenübergestellt.

Tabelle 1.1: Eigenschaften Ibbenbürener Anthrazitkohle und Rheinischer Braunkohle

auf den Rohzustand bezogene Eigenschaft	Ibbenbürener Anthrazitkohle	Rheinische Braunkohle
Massenanteil Wasser nach DIN 51718 [4]	9,00%	54,00%
Massenanteil Asche nach DIN 51719 [5]	8,10%	2,50%
Massenanteil Flüchtige nach DIN 51720 [6]	5,47%	23,50%
Massenanteil Kohlenstoff nach DIN 51733 [7]	76,30%	30,40%
Massenanteil Wasserstoff nach DIN 51733 [7]	3,15%	2,20%
Massenanteil Sauerstoff nach DIN 51733 [7]	1,75%	10,30%
Massenanteil Stickstoff nach DIN 51733 [7]	0,88%	0,40%
Massenanteil Schwefel nach DIN 51733 [7]	0,82%	0,20%
Heizwert nach DIN 5499 [8] in MJ/kg	28,70	10,10
Dichte der Kohle in kg/m^3	1450	940

Der Einsatz einer Mischung beider Kohlen würde sich auf die Massenströme der für den Verbrennungsprozess wesentlichen Betriebsstoffe Kohle und Luft auswirken. Aus den in der vorstehenden Tabelle aufgeführten Eigenschaften geht hervor, dass bei konstanter Feuerungswärmeleistung der Kohlemassenstrom mit zunehmendem Anteil an Rheinischer Braunkohle markant steigen würde, während der Luftmassenstrom und die Summe dieser beiden Massenströme nahezu unverändert bliebe. Dies verdeutlicht die folgende Abbildung, die auf Basis einer entsprechenden Verbrennungsrechnung die relative Änderung der in den Dampferzeuger eintretenden Massenströme über den Anteil an Feuerungswärmeleistung durch Rheinische Braunkohle zeigt.

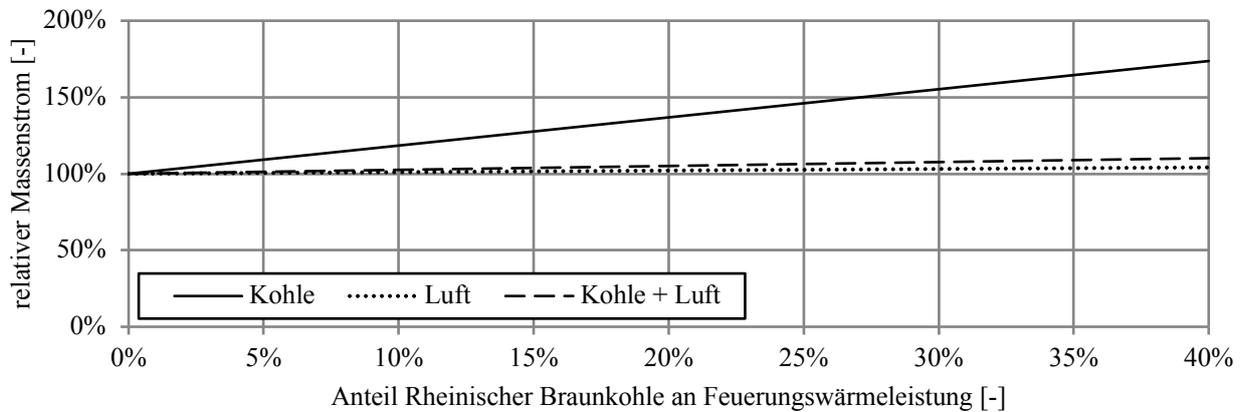


Abbildung 1-2: relative Massenströme von Kohle und Luft bei einem Gesamtluftverhältnis von 1,08

Unbekannt ist, inwiefern sich eine höhere Kohlenstaubkonzentration und die unterschiedliche Ausprägung des Kohlenaufbaus auf den Verbrennungsprozess auswirken würden: Einerseits könnte beispielsweise ein größerer Anteil flüchtiger Bestandteile eine frühere Zündung der Anthrazitkohle bewirken; andererseits könnte der größere Wassereintrag über eine mögliche Temperaturabsenkung die Zündung der Anthrazitkohle verzögern. Dass derartige Wechselwirkungen bei Einsatz von Kohlemischungen auftreten können, zeigten beispielsweise Ikeda et al. [9] oder Hashimoto und Shirai [10]. So stellten Ikeda et al. [9] eine Verlangsamung des Abbrandes einer Gasflammkohle in einer Brennkammer mit einer thermischen Leistung von 0,76 MW fest, als diese gemeinsam mit einer Braunkohle verbrannt wurde, einhergehend mit einem höheren Glühverlust in der Asche. Ursächlich hierfür war nach Ikeda et al. [9] der geringere Sauerstoffpartialdruck an der Oberfläche der Gasflammkohlepartikel, der vom größeren Wassereintrag durch die Braunkohle herrührte. In einer weitergehenden Untersuchung dieser Versuche mittels numerischer Strömungssimulation zeigten Hashimoto und Shirai [10], dass die Verbrennungszone mit zunehmendem Braunkohleanteil weiter entfernt vom Brenner liegt. Hashimoto und Shirai [10] machten hierfür die niedrigere Temperatur im Brennernahbereich aufgrund des größeren Wassereintrags durch die Braunkohle verantwortlich.

Vor diesem Hintergrund scheint es möglich, dass auch bei Einsatz einer Mischung aus Ibbenbürener Anthrazitkohle und Rheinischer Braunkohle der Abbrand langsamer abläuft und der Anteil an Unverbranntem in der Asche größer ausfällt als derzeit üblich. Auch das Aussetzen einer Zündung der Anthrazitkohle kann nicht ausgeschlossen werden. Auf Basis numerischer Strömungssimulationen zu erörtern, inwiefern entsprechende Kohlemischungen mit einem Feuerungswärmeanteil der Rheinischen Braunkohle von bis zu 40% im Dampferzeuger des Kraftwerks Ibbenbüren zünden und abbrennen würden, ist Aufgabe dieser Arbeit.

2 Stand des Wissens

2.1 Allgemeiner Kohlenstaubverbrennungsprozess

Bei Kohlenstaubverbrennungsprozessen wird die Kohle gemahlen und getrocknet, ehe sie mithilfe eines Trägergases in einen Feuerraum eingeblasen wird, in dem der Strahlungswärmeaustausch und die Vermischung des Kohlenstaub-Trägergas-Gemisches mit Rauchgas und Luft die Umwandlung der Kohlepartikel initiiert. Den allgemeinen Kohlenstaubverbrennungsprozess zeichnet aus, dass alle stofflichen Umwandlungen auf fünf sogenannte umwandlungsrelevante Teilprozesse reduziert sind. Diese umfassen die Trocknung der Kohlepartikel, die Primärpyrolyse der trockenen Kohlesubstanz, die Sekundärpyrolyse von Teerstoffen, den Abbrand gasförmiger Bestandteile und die Umwandlung von Koks. Die umwandlungsrelevanten Teilprozesse sind nachstehend erläutert.

Der im Feuerraum zeitlich zuerst einsetzende Teilprozess ist die Trocknung der Kohlepartikel. Anschließend folgen weitere Trenn- und Umwandlungsvorgänge. So entweichen zuerst absorptiv gebundene Gase mit einem Molekulargewicht unter 200 kg/kmol [11]. Ab einer Temperatur von etwa 400 °C wandelt sich die feste Kohlestruktur: Verschiedene Verbindungen dissoziieren, beginnend bei den thermisch instabilsten, zu denen bspw. Wasserstoffbrückenbindungen oder aliphatische Verbindungen zwischen den aromatischen Strukturen zählen [11]. Aus den langkettigen Strukturen entstehen so kleinere Fragmente, sogenannter Metaplast [12] oder sogenanntes Orbitumin [13]. Schnelle Rekombinationsreaktionen lassen verschiedene Gase entstehen, die an die äußere Oberfläche der Partikel diffundieren und in die Gasphase übergehen können [11]. Die während der Primärpyrolyse entweichenden Gase unterscheiden sich in die sogenannten Primärgase und Teerstoffe [14] [11]. Die Teerstoffe umfassen nach Solomon et al. [12] alle Pyrolyseprodukte, die bei Raumtemperatur flüssig sind, außer Wasser. Somit heben sich Teerstoffe von den Primärgasen durch ihre größere molekulare Struktur ab. Der feste Rückstand der Primärpyrolyse heißt Koks.

Die Sekundärpyrolyse umfasst verschiedene Dissoziations- und Rekombinationsreaktionen, aufgrund derer aus den Teerstoffen unter anderem Ruß und verschiedene, leichte Gase entstehen können [14]. Anhand der Reaktionsprodukte unterscheidet sich die Sekundärpyrolyse in zwei Bereiche: Im Niedertemperaturbereich entstehen aus den Teerstoffen überwiegend Ruß, Kohlenstoffmonoxid und leichtere Kohlenwasserstoffe [15] [16] [17]. Im Hochtemperaturbereich hingegen entsteht Wasserstoff anstelle der leichteren Kohlenwasserstoffe [18] [19] [20].

Gasförmige Bestandteile und Ruß verbrennen. Koks hingegen kann sich prinzipiell auf vier Weisen umwandeln [21]: 1) An der Partikeloberfläche kann Koks vollständig abbrennen, sofern dort der Sauerstoffpartialdruck und die Temperatur ausreichend hoch sind. Hierbei entsteht Kohlenstoffdioxid. 2) Koks und Sauerstoff können an der Partikeloberfläche auch zu Kohlenstoffmonoxid reagieren, das in der Gasphase verbrennt. 3) Alternativ kann an der Partikeloberfläche gebildetes Kohlenstoffmonoxid in Oberflächennähe verbrennen. 4) Weiterhin kann Koks an seiner Oberfläche mangels Sauerstoff vergasen, indem Kohlenstoffdioxid und Koks zu Kohlenstoffmonoxid oder Wasserdampf und Koks zu Kohlenstoffmonoxid und Wasserstoff reagieren. Die Ursache für den Sauerstoffmangel liegt in einer partikelnahen Verbrennung des Kohlenstoffmonoxids, wodurch jeglicher Sauerstoff in Partikelnähe gebunden wird.

Üblicherweise beträgt in einer Kohlenstaubfeuerung die Verbrennungstemperatur mehr als 800 °C und der Partikeldurchmesser weniger als 200 µm, sodass Koks und Sauerstoff überwiegend zu Kohlenstoffmonoxid reagieren, das vermehrt außerhalb der Partikelgrenzschicht abbrennt. Dies geht aus der Analyse des Verhältnisses zwischen Kohlenstoffmonoxid und Kohlenstoffdioxid als Produkte des Abbrandes von Graphit und eines Kohlenkokses nach Arthur [22] und ihrer Erweiterung um den Einfluss der Partikelgröße nach Görner [23] hervor, wie Abbildung 2-1 zeigt.

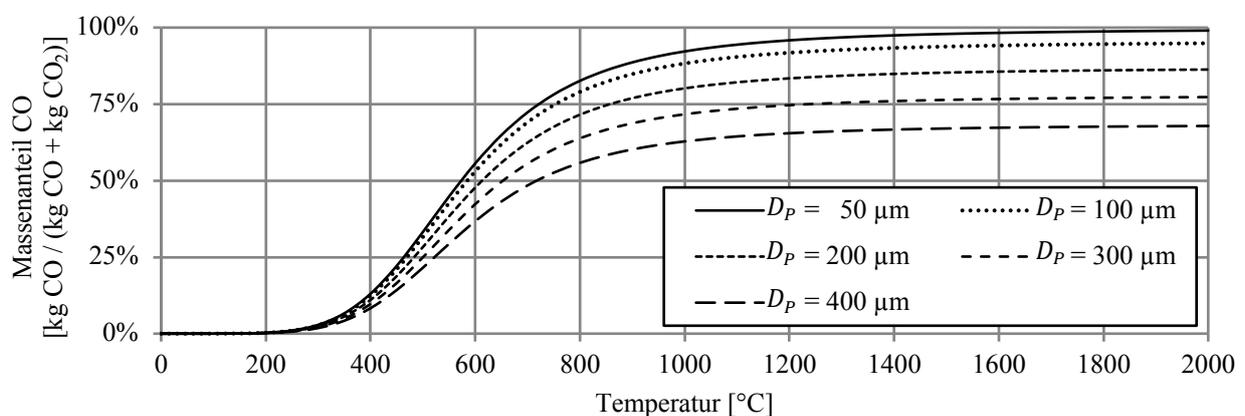


Abbildung 2-1: Anteil Kohlenstoffmonoxid als Produkt des Koksabbrandes [22] [23]

2.2 Wesentliche Aufbau- und Betriebsmerkmale der Feuerung Ibbenbüren

In Ibbenbüren ist eine Schmelzfeuerung mit einer Feuerungswärmeleistung im Volllastbetrieb von etwa 2060 MW installiert. Der Verbrennungsprozess läuft überwiegend in zwei identischen, spiegelsymmetrisch angeordneten Feuerräumen ab. In den Feuerräumen herrscht aufgrund ihrer kompakten Bauweise eine vergleichsweise hohe Temperatur, damit die niederflüchtige Ibbenbürener Anthrazitkohle zündet und abbrennt (vgl. [24]). Im unteren Bereich der Feuerräume strömen die Rauchgase in einen mittig angeordneten Strahlungsraum, ehe sie die Konvektivheizflächen passieren. Ein Schnittbild des Dampferzeugers zeigt Abbildung 2-2.

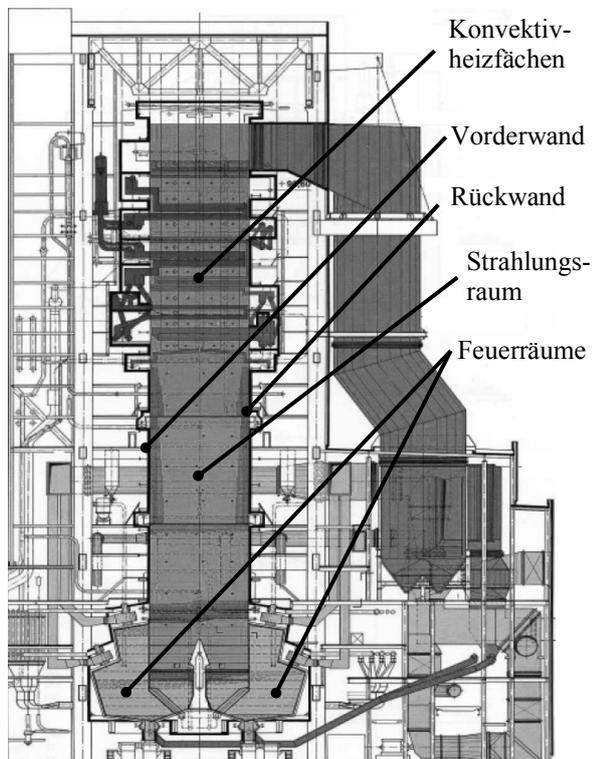


Abbildung 2-2: Seitenwand-paralleler Schnitt durch den Dampferzeuger im Kraftwerk Ibbenbüren [25]

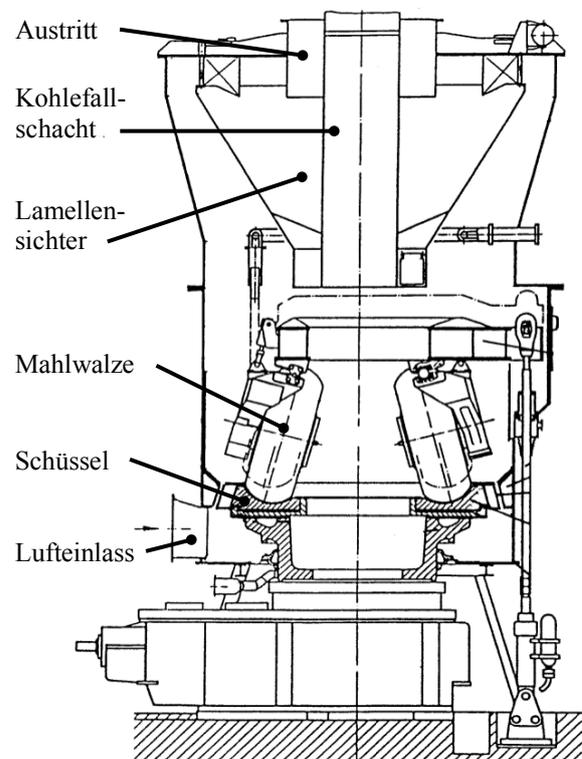


Abbildung 2-3: Walzenschüsselmühle [26]

Zur Mahltrocknung der Rohkohle dienen acht Walzenschüsselmühlen, deren Aufbau Abbildung 2-3 veranschaulicht. Im Volllastbetrieb der Anlage werden sieben von ihnen nahezu gleichmäßig mit Kohle beaufschlagt. Hierzu dient jeweils ein Kohlefallschacht je Mühle, durch den die Kohle auf eine rotierende Schüssel fällt, auf der sie sich der Fliehkraft wegen nach außen bewegt. Dabei überrollen drei Mahlwalzen die Kohle. Am Schüsselrand strömt die Primärluft in vertikaler Richtung nach oben.

Sie erfasst den Kohlenstaub und trägt diesen Richtung Austritt. Währenddessen trocknet der Kohlenstaub. Am Mühlenkopf muss der Kohlenstaub-Luft-Strom einen rotierenden Lamellensichter passieren. Dieser bewirkt eine Rückführung grober Partikel ins Mahlbett. Der den Sichter passierende Kohlenstaub-Luft-Strom verlässt die Walzenschüsselmühle am Mühlenkopf.

Jeder Feuerraum verfügt über 16 Stufenmischbrenner, die in zwei parallelen, vertikal versetzten Reihen im Feuerraumdach installiert sind. Vier Stufenmischbrenner sind an jeweils eine Walzenschüsselmühle angeschlossen. Die Anordnung der Brenner sowie den Aufbau eines Stufenmischbrenners veranschaulichen die nachstehenden Abbildungen.

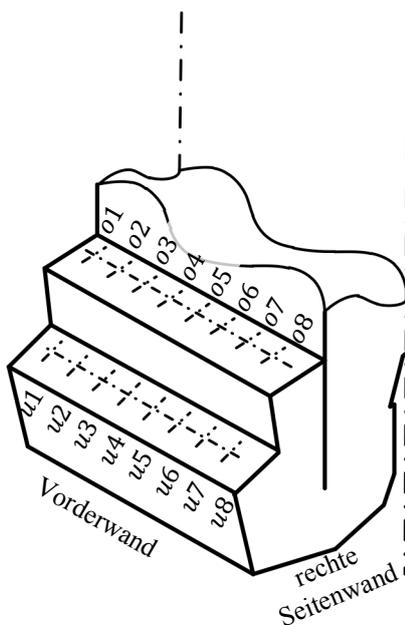


Abbildung 2-4: Anordnung und Zählweise der Brenner

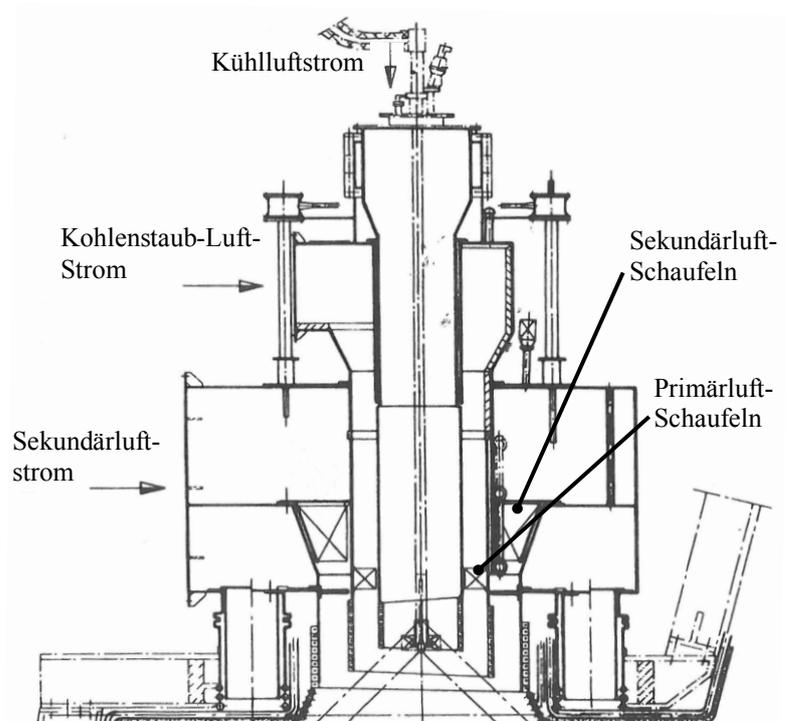


Abbildung 2-5: Stufenmischbrenner [27]

Der Kohlenstaub-Luft-Strom durchströmt im Stufenmischbrenner einen ringspaltförmigen Kanal, ehe er in den Feuerraum eintritt. In diesem Kanal prägen 18 Schaufeln dem Gemisch einen Drall auf. Die Schaufeln schließen mit der Strömungsrichtung einen Winkel von 40° ein. Durch einen größeren, konzentrisch angeordneten ringspaltförmigen Kanal strömt die Sekundärluft in den Feuerraum. Auch in diesem Kanal bewirken 14 Schaufeln eine gleichorientierte Verdrallung. Der Winkel zwischen diesen Schaufeln und der Strömungsrichtung beträgt 60° . Die Drallorientierung von nebeneinander installierten Brennern ist gegensätzlich. Durch den Kern des Brenners strömt die Kühlluft in den Feuerraum.

An der äußeren Seitenwand jedes Feuerraums befinden sich jeweils 16 Öffnungen, durch die versetzt zu den Brennerachsen und nach unten geneigt die Tertiärluft eintritt (siehe Abbildung 4-1).

Mit der hohen Temperatur in den Feuerräumen geht ein Aufschmelzen der Aschepartikel einher. Diese setzen sich überwiegend an den Feuerraumwänden ab und fließen in Richtung entsprechender Auslässe im Feuerraumboden, durch die die flüssigen Ascheströme abgeschieden werden.

Zur Bereitstellung der Verbrennungsluft dienen zwei parallel geschaltete Stränge, deren wesentliche Aggregate jeweils ein Frischlüfter und ein in Strömungsrichtung folgender Luftvorwärmer sind. Der gesamte Luftmassenstrom wird über die Laufschaufelverstellung der Frischlüfter geregelt, sodass im Volllastbetrieb der Anlage das Gesamtluftverhältnis einen Wert von etwa 1,08 annimmt. In diesem Lastzustand erwärmt sich die Luft in den Luftvorwärmern auf etwa 385 °C. Die Luftströme beider Stränge strömen hinter den Luftvorwärmern in einen Ringkanal, von dem aus verschiedene Kanäle zu den entsprechenden Feuerraumeintritten führen. Acht parallel geschaltete Primärlüfter saugen unmittelbar vor und hinter den Luftvorwärmern die Primärluft an und fördern diese in jeweils eine Kohlemühle. Die Warmluftströme werden so geregelt, dass der jeweilige Primärluftmassenstrom einen anlagenlastspezifischen Wert annimmt. Der entsprechende Kaltluftstrom wird auf eine Temperatur am Mahltrocknungsanlagenaustritt von etwa 100 °C geregelt. Der Aufbau des Luftsystems und eine betriebsübliche Aufteilung des Luftgesamtstromes im Volllastbetrieb sind nachstehend dargestellt.

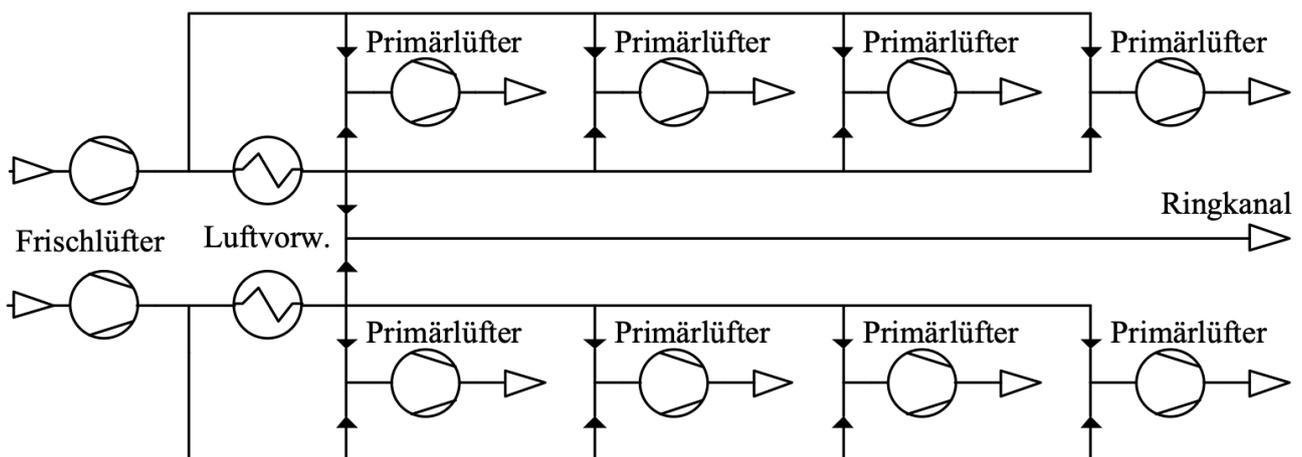


Abbildung 2-6: vereinfachtes R&I-Fließschema des Luftsystems

Tabelle 2.1: betriebsübliche Aufteilung des Luftgesamtmassenstroms im Volllastbetrieb

Luftstrom	Primärluft	Sekundärluft	Tertiärluft	Kühlluft
Massenanteil	13%	54%	29%	4%

3 Modellierung des allgemeinen Kohlenstaubverbrennungsprozesses

Kohlenstaubverbrennungsprozesse können auf verschieden detaillierte Weise abstrahiert werden. Die Prozessabstraktion in der Detailtiefe der Molekularbewegung bildet die Grundlage der durchgeführten Simulationen. Aus dieser Prozessbeschreibung ist nämlich die simulierte, weniger detaillierte Prozessbeschreibung in der Detailtiefe der Strömungsbewegung abgeleitet, da zur Bewältigung der Aufgabenstellung eine Betrachtung von in Zeit und Raum gemittelten Prozessgrößen genügt.

In jeweils einem der folgenden Unterkapitel ist die Prozessabstraktion in der Detailtiefe der Molekularbewegung, die Prozessabstraktion in der Detailtiefe der Strömungsbewegung und die Modellierung nicht anwendungsspezifischer Prozessmerkmale erläutert. Im abschließenden Unterkapitel sind die resultierenden Bilanzgleichungen dargestellt.

3.1 Prozessabstraktion in der Detailtiefe der Molekularbewegung

In den zwei folgenden Unterkapiteln sind die physikalischen Grundlagen als Voraussetzung zur Beschreibung des allgemeinen Kohlenstaubverbrennungsprozesses in der Detailtiefe der Molekularbewegung und die eigentliche Prozessabstraktion beschrieben.

3.1.1 Physikalische Grundlagen

Die Beschreibung des allgemeinen Kohlenstaubverbrennungsprozesses in der Detailtiefe der Molekularbewegung basiert auf der von Einstein [28] skizzierten Unterscheidung eines jeden physikalisch real existierenden Raumes anhand der Natur seiner Zustandsänderung in diskret verteilte Materie und verschiedene Felder. So ist jede Zustandsänderung von Materie auf die unmittelbare Wirkung eines Feldes, eine sogenannte Nahwirkung, zurückzuführen und durch die Newtonschen Axiome beschreibbar. Jede Zustandsänderung eines Feldes hingegen unterliegt nicht den Newtonschen Axiomen und breitet sich mit Lichtgeschwindigkeit aus.

In der Detailtiefe der Molekularbewegung entspricht Materie verschiedenen Molekülen. Jedes beliebige Molekül hat die Eigenschaften harmonischer Oszillatoren [29], aufgrund derer es Energie in Form von Transversalwellen gekoppelter elektrischer und magnetischer Felder, sogenannte elektromagnetische Strahlung, emittieren, absorbieren und reflektieren kann. Folglich können Moleküle mittels elektromagnetischer Strahlung miteinander interagieren.

Weiterhin ist jedes Molekül in seinem Nahbereich von einem elektrischen Feld umgeben [30]. Die Nahwirkung dieser Felder bestimmt, wie sich die Moleküle relativ zueinander verhalten, worin sich der Aggregatzustand eines Stoffes wie folgt widerspiegelt: In einem festen Stoff bewegt sich jedes Molekül um eine eigene Gleichgewichtsposition, die sich ohne den Einfluss einer äußeren Kraft relativ zu den Gleichgewichtspositionen der anderen Moleküle nicht ändert [31]. Moleküle eines flüssigen Stoffes nehmen keine Gleichgewichtsposition ein [31]. Trotz der Translation ihrer Moleküle behält eine Flüssigkeit ohne den Einfluss einer äußeren Kraft ihr Volumen [31]. Jedes Molekül eines gasförmigen Stoffes beschreibt ebenfalls eine Translation, die jedoch überwiegend unbeeinflusst von der Nahwirkung der übrigen Moleküle erfolgt [31]. Unabhängig vom Aggregatzustand eines Stoffes und über die Translation hinausgehend, können Moleküle prinzipiell um ihren Schwerpunkt rotieren und sich periodisch deformieren [31].

3.1.2 Eigentliche Prozessabstraktion

Die Suspension des allgemeinen Kohlenstaubverbrennungsprozesses ist ein Gemisch, dessen Bestandteilen ein maßgeblicher Einfluss auf den Prozess unterstellt ist. Die Bestandteile dieses Gemisches sind zum einen Moleküle unterschiedlicher Gase und zum anderen verschiedene Partikel. Hierbei sind die Partikel ihrer ursprünglichen Kohlesorte und Größe nach in verschiedene Klassen unterschieden, die mittels der Größe p indiziert sind. Die anwendungsspezifische Festlegung der Partikelklassen ist in Unterkapitel 4.2 erläutert. Die Prozessabstraktion geht mit unterschiedlichen Vorstellungen über den Aufbau von Partikeln einher: Dass die Partikel einer Klasse ausschließlich aus einem Bestandteil bestehen, ist eine Vorstellung, die ausschließlich der Beschreibung ihrer Bewegung dient. Der Beschreibung ihres übrigen Verhaltens liegt die Vorstellung zugrunde, dass sich die Partikel einer Klasse homogen aus allen Bestandteilen der Klasse zusammensetzen. Eine Übersicht über alle berücksichtigten Bestandteile der Suspension sowie den sie kennzeichnenden tiefgestellten Index b ist durch die zwei nachstehenden Tabellen gegeben.

Tabelle 3.1: Bestandteile der Gasphase

Bestandteil	Index b
Kohlenstoffdioxid	CO_2
Kohlenstoffmonoxid	CO
Methan	CH_4
Ruß	RU
Sauerstoff	O_2
Schwefeldioxid	SO_2
Stickstoff	N_2
Teerstoffe	TS
Wasserdampf	H_2O
Wasserstoff	H_2

Tabelle 3.2: Bestandteile der Partikelphase

Bestandteil	Index b
Asche der Klasse p	A_p
Kohle der Klasse p	KL_p
mineralstofffreie Kohlesubstanz der Klasse p	$mfKL_p$
mineralstofffreie Kokssubstanz der Klasse p	$mfKK_p$
mineralstoff- und wasserfreie Kohlesubstanz der Klasse p	$mwfKL_p$

Ruß ist als ein Bestandteil der Gasphase berücksichtigt (vgl. Tabelle 3.1). Rußpartikel sind nämlich so klein, dass ihr Verhalten demjenigen von Molekülen eines Gases gleiche.

Zur quantitativen Beschreibung der Suspension dienen verschiedene materieszpezifische Größen. Diese geben im Schwerpunkt eines Moleküls der Gasphase oder eines Partikels den Wert der entsprechenden Größe wieder und nehmen ansonsten den Wert null an. Fast alle materieszpezifischen Größen sind auf die Masse der jeweiligen Phase bezogene Größen, was die tiefgestellten Indizes G für die Gasphase und P für die Partikelphase kenntlich machen. Stellvertretend für beide Indizes steht der Index Ph . Die phasenspezifischen Größen umfassen die Dichte ρ_{Ph} , die Geschwindigkeit der Translation $\mathbf{u}_{Ph,i}$ in Richtung einer Koordinate (indiziert durch i, j und k), den Massenanteil $x_{Ph,b}$ eines Bestandteils, die Energie der inneren Bewegungen (Rotation und Deformation) $e_{iB,Ph}$, die chemische Energie $e_{chem,Ph}$ als Energie der intra- und intermolekularen Bindungen, die gerichtete Phasenwechselbeschleunigung $\mathbf{f}_{Ph,i}$ als Beschleunigung während einer phasenübergreifenden Wechselwirkung und die auf Wärmestrahlung beruhende Energieänderung $\mathbf{S}_{Str,Ph}$. Eine materieszpezifische, nicht phasenspezifische Größe ist die bestandteilspezifische Massenänderung $\mathbf{S}_{M,b}$.

Die quantitative Beschreibung der elektromagnetischen Wellen erfolgt durch jeweils eine spektrale Strahlungsdichte $L_{\lambda,x}$ je Wellenlänge λ und Raumrichtung x . Die spektrale Strahlungsdichte entspricht der auf die Strahlungsfläche und -dauer, die Wellenlänge und den Raumwinkel Ω bezogenen Energie der entsprechenden Strahlungswelle [32] [33]. Elektromagnetische Wellen sind ausschließlich im Bereich der Wärmestrahlung berücksichtigt. Dieser Bereich umfasst Wellen mit einer Länge

von etwa 0,1 bis 1000 μm [34]. Neben den Wärmestrahlungsfeldern wirkt ein weiteres zeit- und raumfüllendes Feld: das Erdgravitationsfeld, das als konservatives Kraftfeld mit der gerichteten Beschleunigung g_i angenommen ist.

Die Bilanzgleichungen bringen zum Ausdruck,

- dass sich die Masse eines Bestandteils ausschließlich aufgrund eines stofflichen Umwandlungsprozesses ändert,

$$\frac{d}{dt} [\rho_{Ph} \mathbf{x}_{Ph,b} \cdot dV] = \mathbf{S}_{M,b} \cdot dV \quad (3.1)$$

- dass sich der Impuls jeder Phase ausschließlich aufgrund einer Wechselwirkung mit dem Gravitationsfeld der Erde oder mit der jeweils anderen Phase ändert,

$$\frac{d}{dt} [\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i} \cdot dV] = [g_i + \mathbf{f}_{Ph,i}] \rho_{Ph} \cdot dV \quad (3.2)$$

- dass sich die gesamte Energie jeder Phase ausschließlich aufgrund einer Wechselwirkung mit dem Gravitationsfeld der Erde, mit der jeweils anderen Phase oder mit der Wärmestrahlung ändert

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[\rho_{Ph} \left(\mathbf{e}_{iB,Ph} + \mathbf{e}_{chem,Ph} + \frac{1}{2} \mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,i} \right) \cdot dV \right] \\ = [g_i + \mathbf{f}_{Ph,i}] \rho_{Ph} \cdot dV \cdot \frac{dx_i}{dt} + \mathbf{S}_{Str,Ph} \cdot dV \end{aligned} \quad (3.3)$$

- und dass eine Änderung der spektralen Strahlungsdichte ausschließlich aufgrund der Emission, Absorption oder Reflexion von Strahlung erfolgt:

$$\frac{d}{dx} \mathbf{L}_{\lambda,x} = \frac{d}{dx} \mathbf{L}_{\lambda,x} \Big|_{ems} + \frac{d}{dx} \mathbf{L}_{\lambda,x} \Big|_{abs} + \frac{d}{dx} \mathbf{L}_{\lambda,x} \Big|_{rfl} \quad (3.4)$$

Für die vorstehenden Bilanzgleichungen bestehen die Randbedingungen,

- dass die mit einem stofflichen Umwandlungsprozess einhergehende, mögliche Änderung der Gesamtmasse gegenüber der Gesamtmasse vernachlässigbar gering sei,

$$\sum_b \left(\frac{d}{dt} [\rho_{Ph} \mathbf{x}_{Ph,b} \cdot dV] \right) - \sum_b (\mathbf{S}_{M,b} \cdot dV) \approx \sum_b \left(\frac{d}{dt} [\rho_{Ph} \mathbf{x}_{Ph,b} \cdot dV] \right) \quad (3.5)$$

- dass bei einer unmittelbaren Wechselwirkung zwischen einem Molekül der Gasphase und einem Partikel die wirkenden Kräfte und Energien entgegengesetzt und gleich groß sind

$$\mathbf{f}_{G,i}\rho_G = -\mathbf{f}_{P,i}\rho_P \quad (3.6)$$

$$\mathbf{f}_{G,i}\rho_G\mathbf{u}_{G,i} = -\mathbf{f}_{P,i}\rho_P\mathbf{u}_{P,i} \quad (3.7)$$

- und dass die auf Wärmestrahlung beruhende Energieänderung dem negativen Integral der nach der Richtung differenzierten spektralen Strahlungsdichte über alle Wellenlängen der Wärmestrahlung und alle Richtungen des Raumes gleicht (vgl. [35]):

$$\mathbf{S}_{Str,Ph} = - \int_{4\pi} \int_{\lambda=0,1\mu m}^{\lambda=1000\mu m} \left[\frac{d}{dx} \mathbf{L}_{\lambda,x} \right] \cdot d\lambda \cdot d\Omega \quad (3.8)$$

3.2 Prozessabstraktion in der Detailtiefe der Strömungsbewegung

Die Abstraktion des Kohlenstaubverbrennungsprozesses in der Detailtiefe der Strömungsbewegung beinhaltet zum einen die Ableitung von Bilanzgleichungen zur Betrachtung einer exakten Strömungsbewegung, systematisch erläutert in Unterkapitel 3.2.1 und dargestellt in Anhang A, und zum anderen eine Vereinfachung dieser Bilanzgleichungen, systematisch erläutert in Unterkapitel 3.2.2 und dargestellt in Anhang B.

3.2.1 Ableitung der Bilanzgleichungen der exakten Strömungsbewegung

Die Bilanzgleichungen (3.1) bis (3.3) beschreiben die Molekularbewegung der Materie der Suspension auf Lagrangesche Weise. Da eine Prozessbetrachtung auf Eulersche Weise einen geringeren Aufwand zur Berechnung des resultierenden Gleichungssystems erfordert, sind die genannten Bilanzgleichungen mithilfe des Reynoldsschen Transporttheorems (A.1) entsprechend transformiert.

Die Betrachtung gemittelter Prozessgrößen basiert darauf, dass Maxwell [36] und Reynolds [37] die sich ständig ändernde Translation der Moleküle eines Gases als Superposition einer über Zeit und Raum gemittelten Bewegung, der mean-motion [37] bzw. Molarbewegung, und einer dementsprechend fluktuierenden Bewegung, der relative-motion [37] bzw. Wärmebewegung, beschrieben, und

dass Reynolds [37] die Molarbewegung wiederum als Superposition einer über Zeit und Raum gemittelten Bewegung, der mean-mean-motion [37] bzw. Strömungsbewegung, und einer dementsprechend fluktuierenden Bewegung, der relative-mean-motion [37] bzw. Turbulenz, auffasste. Dieses Superpositionsprinzip ist in Abbildung 3-1 veranschaulicht.

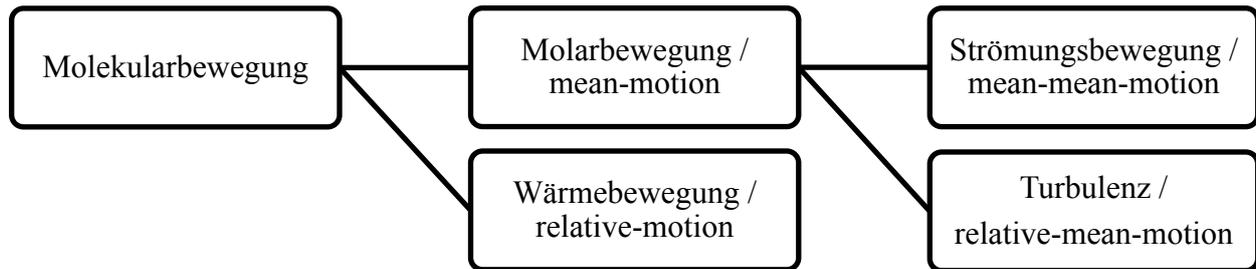


Abbildung 3-1: Superposition der verschiedenen Bewegungen [37]

Die Anteile der verschiedenen Bewegungen sind am Beispiel einer allgemeinen Größe Φ an der zeit-räumlichen Stelle X_1 nachstehend definiert. Hierbei bezeichnet ein nach unten offenes Dach einen der Molarbewegung zugehörigen Mittelwert und ein Balken einen der Strömungsbewegung zugehörigen Mittelwert. Ein einfaches und ein doppeltes Apostroph kennzeichnen die entsprechenden Fluktuationswerte.

$$\hat{\Phi}\langle X_1 \rangle := \frac{\int_{X^{Wb}\langle X_1 \rangle} [\Phi\langle X \rangle] \cdot dX}{\int_{X^{Wb}\langle X_1 \rangle} [1] \cdot dX} \quad (3.9)$$

$$\bar{\Phi}\langle X_1 \rangle := \frac{\int_{X^{Tu}\langle X_1 \rangle} [\hat{\Phi}\langle X \rangle] \cdot dX}{\int_{X^{Tu}\langle X_1 \rangle} [1] \cdot dX} \quad (3.10)$$

$$\Phi'\langle X_1 \rangle := \Phi\langle X_1 \rangle - \hat{\Phi}\langle X_1 \rangle \quad (3.11)$$

$$(\hat{\Phi})''\langle X_1 \rangle := \hat{\Phi}\langle X_1 \rangle - \bar{\Phi}\langle X_1 \rangle \quad (3.12)$$

Die zeit-räumlichen Mittelungsintervalle heißen Skala der Wärmebewegung X^{Wb} und Skala der Turbulenz X^{Tu} . Sie sind Funktionen von Zeit und Raum, von deren Definition der zeit-räumliche Verlauf der Mittel- und Fluktuationswerte abhängt. Es ist nämlich möglich, dass über die entsprechende Skala ein Mittelwert fluktuiert und ein Fluktuationswert einen mittleren Wert ungleich null annimmt.

Die angewendete Definition der Skala der Wärmebewegung ist an die Eigenschaft der Suspension geknüpft, sich an jeder zeit-räumlichen Stelle im Zustand des lokalen thermodynamischen Gleichgewichtes zu befinden. In diesem Zustand kommt es innerhalb der Skala der Wärmebewegung zu so vielen intermolekularen Wechselwirkungen, dass die intensiven Zustandsgrößen der Molekularbewegung durch Gleichgewichtsverteilungen beschrieben sind (vgl. [38]). Weiterhin ist im Zustand des lokalen thermodynamischen Gleichgewichtes die Änderung von Zustandsgrößen der Molarbewegung innerhalb der Skala der Wärmebewegung vernachlässigbar gering (vgl. [39] [40]). Dementsprechend gleicht das Integral einer beliebigen Größe der Molekularbewegung über die Skala der Wärmebewegung an jeder Stelle X_2 innerhalb der Skala der Wärmebewegung an der Stelle X_1 näherungsweise dem Integral der Größe über die Skala der Wärmebewegung an der Stelle X_1 :

$$\int_{X^{wb}\langle X_2 \rangle} [\Phi\langle X \rangle] \cdot dX \approx \int_{X^{wb}\langle X_1 \rangle} [\Phi\langle X \rangle] \cdot dX \quad \text{für alle } X_2 \in X^{wb}\langle X_1 \rangle \quad (3.13)$$

Die Skala der Turbulenz X^{Tu} ist für die Simulation in dem Bereich, der nach unten durch die Skala der Wärmebewegung beschränkt ist, prinzipiell frei wählbar. Je größer sie gewählt wird, umso mehr wird das Zeitverhalten des Mittelwertes gedämpft. Die Skala der Turbulenz ist als zeitliches Mittelungsintervall so groß gewählt, dass ein nach Gleichung (3.10) definierter Mittelwert Zeit-unabhängig ist, und dass ein nach Gleichung (3.12) definierter Fluktuationwert im Mittel den Wert null annimmt:

$$\int_{X^{Tu}\langle X_2 \rangle} [\hat{\Phi}\langle X \rangle] \cdot dX = \int_{X^{Tu}\langle X_1 \rangle} [\hat{\Phi}\langle X \rangle] \cdot dX \quad \text{für alle } X_2 \in X^{Tu}\langle X_1 \rangle \quad (3.14)$$

Da ein nach Gleichung (3.10) definierter Mittelwert keine Funktion der Zeit ist, nimmt jedes partielle Differential nach der Zeit eines solchen Mittelwertes den Wert null an:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\bar{\Phi}] = 0 \quad (3.15)$$

Aus der Definition beider Skalen folgt, dass die nach den Gleichungen (3.9) und (3.10) definierten Mittelwerte über die jeweilige Skala hinweg konstant sind (siehe Gleichung (A.6) bzw. (A.7)) und dass die nach den Gleichungen (3.11) und (3.12) definierten Fluktuationswerte über die jeweilige Skala hinweg den Wert null annehmen (siehe Gleichung (A.10) bzw. (A.11)). Vor diesem Hintergrund entsprechen die nach den Gleichungen (3.9) und (3.10) definierten Mittelwerte ausschließlich dem Anteil der jeweiligen mittleren Bewegung und die nach den Gleichungen (3.11) und (3.12) definierten Fluktuationswerte ausschließlich dem Anteil der entsprechenden fluktuierenden Bewegung.

Die eindeutige Zuordnung der Mittel- und Fluktuationswerte auf die verschiedenen Bewegungen ermöglicht die Ableitung von Bilanzgleichungen zur Betrachtung der Molarbewegung, indem die Terme der Bilanzgleichungen zur Betrachtung der Molekularbewegung in einen nach Gleichung (3.9) definierten Mittelwert und einen nach Gleichung (3.11) definierten Fluktuationswert unterschieden und die Mittelwerte dem Superpositionsprinzip gemäß separat betrachtet sind. In analoger Weise gehen aus den Bilanzgleichungen zur Betrachtung der Molarbewegung die Bilanzgleichungen zur Betrachtung der Strömungsbewegung hervor.

Bei der Separation der Anteile einer mittleren und fluktuierenden Bewegung ist zu beachten, dass das Produkt von Anteilen der gleichen fluktuierenden Bewegung aus einem Anteil der entsprechenden mittleren Bewegung bestehen kann, falls die Größen korrelieren (vgl. [41] [42] [43]). Zwecks einer Reduktion derartiger Kovarianzterme sind die Anteile der Bewegungen an denjenigen Größen, die in den Bilanzgleichungen in einem Produkt mit der Dichte der entsprechenden Phase enthalten sind, anders definiert. Die Mittelung erfolgt in Anlehnung an Reynolds [37] nicht ausschließlich zeit-räumlich, sondern zusätzlich mit der entsprechenden Dichte gewichtet, was im allgemeinen Sprachgebrauch als Favre-Mittelung bekannt ist:

$$\check{\Phi}\langle X_1 \rangle := \frac{\int_X W b_{\langle X_1 \rangle} [\rho_{Ph}\langle X \rangle \cdot \Phi\langle X \rangle] \cdot dX}{\int_X W b_{\langle X_1 \rangle} [\rho_{Ph}\langle X \rangle] \cdot dX} \quad (3.16)$$

$$\check{\check{\Phi}}\langle X_1 \rangle := \frac{\int_X T u_{\langle X_1 \rangle} [\hat{\rho}_{Ph}\langle X \rangle \cdot \check{\Phi}\langle X \rangle] \cdot dX}{\int_X T u_{\langle X_1 \rangle} [\hat{\rho}_{Ph}\langle X \rangle] \cdot dX} \quad (3.17)$$

$$\Phi^*\langle X_1 \rangle := \Phi\langle X_1 \rangle - \check{\Phi}\langle X_1 \rangle \quad (3.18)$$

$$(\check{\Phi})^{**}\langle X_1 \rangle := \check{\Phi}\langle X_1 \rangle - \check{\check{\Phi}}\langle X_1 \rangle \quad (3.19)$$

Hierbei bezeichnet ein nach oben offenes Dach einen der Molarbewegung zugehörigen dichtegemittelten Mittelwert und eine Tilde einen der Strömungsbewegung zugehörigen dichtegemittelten Mittelwert. Ein einfaches und ein doppeltes Sternchen kennzeichnen die entsprechenden dichtegemittelten Fluktuationswerte. Fett markierte Größen sind Größen der Molekularbewegung. Im weiteren Textverlauf ist zwecks besserer Lesbarkeit der Anteil der Molarbewegung an einer solchen Größe nicht fett markiert, wie es in den nachstehenden Tabellen zusammengefasst ist.

Tabelle 3.3: Neuzeichnung nicht massen-
gemittelter Größen der Molarbewegung

Größe	Definition
allgemeine Größe	$\Phi := \hat{\Phi}$
Dichte	$\rho_{Ph} := \hat{\rho}_{Ph}$
Massenquellterm	$S_{M,b} := \hat{S}_{M,b}$
Phasenwechsel- beschleunigung	$f_{Ph,i} := \hat{f}_{Ph,i}$
spektrale Strahlungs- dichte	$L_{\lambda,x} := \hat{L}_{\lambda,x}$
Strahlungsquellterm	$S_{Str,Ph} := \hat{S}_{Str,Ph}$

Tabelle 3.4: Neuzeichnung massen-
gemittelter Größen der Molarbewegung

Größe	Definition
allgemeine Größe	$\Phi := \check{\Phi}$
chemische Energie	$e_{chem,Ph} := \check{e}_{chem,Ph}$
Energie der inneren Bewegungen	$e_{iB,Ph} := \check{e}_{iB,Ph}$
innere Energie	$U_{Ph} := \check{U}_{Ph}$
Geschwindigkeit	$u_{Ph,j} := \check{u}_{Ph,j}$
Massenanteil	$x_{Ph,b} := \check{x}_{Ph,b}$

Trotz der verschiedenen Mittelungen enthalten die Bilanzgleichungen zur Beschreibung der Strömungsbewegung verschiedene Kovarianzterme. Einige Kovarianzterme sind zu verschiedenen Größen zusammengefasst. Die Definition dieser Größen ist, unterschieden nach Bilanzgrößen, Größen zur Beschreibung des Stoffverhaltens und Größen zur Beschreibung des Strömungsverhaltens, in den nachstehenden Tabellen aufgeführt.

Tabelle 3.5: auf Kovarianztermen beruhende Bilanzgrößen

Größe	Definition Gasphase	Definition Partikelphase
innere Energie	$U_G := e_{iB,G} + e_{chem,G} + \frac{u_{G,i}^* u_{G,i}^*}{2}$	$U_P := e_{iB,P} + e_{chem,P} + \frac{u_{P,i}^* u_{P,i}^*}{2}$
Turbulenzenergie	$k_G := \frac{u_{G,i}^{**} u_{G,i}^{**}}{2}$	$k_P := \frac{u_{P,i}^{**} u_{P,i}^{**}}{2}$

Tabelle 3.6: das Stoffverhalten beschreibende Größen

Größe	Definition Gasphase [36]	Definition Partikelphase
wärmeinduzierte Massendiffusion	$j_{G,b,j}^{Wb} := \rho_G (\overline{x_{G,b} u_{G,j}^*})$	$j_{P,b,j}^{Wb} := \rho_P (\overline{x_{P,b} u_{P,j}^*})$
wärmeinduzierte Spannung	$\sigma_{G,i,j}^{Wb} := \rho_G (\overline{u_{G,i} u_{G,j}^*})$	$\sigma_{P,i,j}^{Wb} := \rho_P (\overline{u_{P,i} u_{P,j}^*})$
wärmeinduzierte Wärmeleitung	$\dot{q}_{leit,G,j}^{Wb} := \rho_G (\overline{U_G u_{G,j}^*})$	$\dot{q}_{leit,P,j}^{Wb} := \rho_P (\overline{U_P u_{P,j}^*})$

Tabelle 3.7: das Strömungsverhalten beschreibende Größen

Größe	Definition Gasphase	Definition Partikelphase
turbulenzinduzierte Massendiffusion	$j_{G,b,j}^{Tu} := \rho_G(\overline{\mathbf{x}_{G,b} \mathbf{u}_{G,j}^{**}})$	$j_{P,b,j}^{Tu} := \rho_P(\overline{\mathbf{x}_{P,b} \mathbf{u}_{P,j}^{**}})$
turbulenzinduzierte Spannung	$\sigma_{G,i,j}^{Tu} := \rho_G(\overline{\mathbf{u}_{G,i} \mathbf{u}_{G,j}^{**}})$	$\sigma_{P,i,j}^{Tu} := \rho_P(\overline{\mathbf{u}_{P,i} \mathbf{u}_{P,j}^{**}})$
turbulenzinduzierte Wärmeleitung	$\dot{q}_{leit,G,j}^{Tu} := \rho_G(\overline{\mathbf{U}_G \mathbf{u}_{G,j}^{**}})$	$\dot{q}_{leit,P,j}^{Tu} := \rho_P(\overline{\mathbf{U}_P \mathbf{u}_{P,j}^{**}})$
bewegungsinduzierte Turbulenzproduktion	$G_G^{Bew} := -\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_{G,i})$	$G_P^{Bew} := -\bar{\sigma}_{P,i,j}^{Tu} \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_{P,i})$
umwandlungsinduzierte Turbulenzproduktion	$G_G^{Umw} := \frac{1}{2} \tilde{u}_{G,i} \tilde{u}_{G,i} \sum_{b(G)} [\bar{S}_{M,b}]$	$G_P^{Umw} := \frac{1}{2} \tilde{u}_{P,i} \tilde{u}_{P,i} \sum_{b(P)} [\bar{S}_{M,b}]$
Dissipation der Strömungsbewegung	$\varepsilon_G^{Sb} := -\bar{\rho}_G^{-1} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb} \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_{G,i})$	$\varepsilon_P^{Sb} := -\bar{\rho}_P^{-1} \bar{\sigma}_{P,i,j}^{Wb} \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_{P,i})$
Dissipation der Turbulenz	$\varepsilon_G^{Tu} := -\bar{\rho}_G^{-1} \left(\overline{\sigma_{G,i,j}^{Wb} \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{u}_{G,i}^{**})} \right)$	$\varepsilon_P^{Tu} := -\bar{\rho}_P^{-1} \left(\overline{\sigma_{P,i,j}^{Wb} \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{u}_{P,i}^{**})} \right)$
umwandlungsinduzierte Dissipation	$\varepsilon_G^{Umw} := \frac{1}{2\bar{\rho}_G} \overline{(\mathbf{u}_{G,i}^2 \sum_{b(G)} [S_{M,b}])}$	$\varepsilon_P^{Umw} := \frac{1}{2\bar{\rho}_P} \overline{(\mathbf{u}_{P,i}^2 \sum_{b(P)} [S_{M,b}])}$

Die gemäß den vorstehenden Ausführungen abgeleiteten Bilanzgleichungen sind nachfolgend aufgeführt. Sie stellen die Bilanz des Anteils der Strömungsbewegung

- an der Masse eines Bestandteils,

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{x}_{Ph,b} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{J}_{Ph,b,j}^{Tu} + \bar{J}_{Ph,b,j}^{Wb}] = \bar{S}_{M,b} \quad (3.20)$$

- am gerichteten Impuls der Translation,

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb}] = g_i \bar{\rho}_{Ph} + \tilde{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph} \quad (3.21)$$

- an der kinetischen Energie der Strömungsbewegung

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} + \tilde{u}_{Ph,i} \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \tilde{u}_{Ph,i} \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb} \right] \\ &= -G_{Ph}^{Bew} - G_{Ph}^{Umw} - \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Sb} + g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} + \tilde{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \end{aligned} \quad (3.22)$$

- an der Turbulenzenergie \tilde{k}_{Ph} ,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \tilde{k}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{\rho}_{Ph} (\overline{k_{Ph} u_{Ph,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{Ph,i,j}^{Wb} u_{Ph,i}^{**})} \right] \\ & = G_{Ph}^{Bew} + G_{Ph}^{Umw} - \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Tu} - \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Umw} + \bar{\rho}_{Ph} (\overline{f_{Ph,i}^{**} u_{Ph,i}^{**}}) \end{aligned} \quad (3.23)$$

- an der inneren Energie \tilde{U}_{Ph} ,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \tilde{U}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j} + \overline{(\rho_{Ph} (\mathbf{U}_{Ph} u_{Ph,j}^{**}))} + \overline{(\rho_{Ph} (\mathbf{U}_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i}^{**}))} \right] \\ & = \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Sb} + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Tu} + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Umw} + \bar{S}_{Str,Ph} + \bar{\rho}_{Ph} (\overline{(\mathbf{f}_{Ph,i}^{**} \mathbf{u}_{Ph,i}^{**})}) \end{aligned} \quad (3.24)$$

- und an der spektralen Strahlungsdichte dar.

$$\frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} = \frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} \Big|_{ems} + \frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} \Big|_{abs} + \frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} \Big|_{rfl} \quad (3.25)$$

Anhand der Bilanzgleichungen zur Betrachtung des Anteils der Strömungsbewegung an der kinetischen Energie der Strömungsbewegung, der Turbulenzenergie und der inneren Energie wird der Zusammenhang zwischen Strömungsbewegung, Turbulenz und Wärmebewegung deutlich: Aus den räumlichen Differentialen geht hervor, dass die Energie jeder genannten Bewegung von jeder Bewegung auf unterschiedliche Weise durch den Raum transportiert wird. So wird die Energie einer jeden Bewegung mit der Geschwindigkeit der jeweiligen Bewegung und der Bewegungen mit einem höheren zeit-räumlichen Mittelungsintervall konvektiv transportiert. Dieser Konvektion ist aufgrund der Spannung der feineren Bewegungen eine Diffusion von Energie überlagert. Bei der Konvektion und Diffusion von Energie handelt es sich um Energietransporte, die ausschließlich innerhalb einer Bewegung stattfinden. Demgegenüber findet auch ein Energietransport zwischen den verschiedenen Bewegungen statt. So geht die Energie der Strömungsbewegung durch die bewegungsinduzierte und die umwandlungsinduzierte Turbulenzproduktion G_{Ph}^{Bew} bzw. G_{Ph}^{Umw} in Turbulenzenergie und durch die Dissipation der Strömungsbewegung ε_{Ph}^{Sb} in innere Energie über. Durch die Dissipation der Turbulenz ε_{Ph}^{Tu} und die umwandlungsinduzierte Dissipation ε_{Ph}^{Umw} geht Turbulenzenergie ebenfalls in innere Energie über. Die mittleren Turbulenzproduktionen und die mittleren Dissipationen sind überwiegend positiv, sodass die Energie einer Bewegung überwiegend in Energie feinerer Bewegungen übergeht (vgl. [44] [45]).

Zur Definition der Dissipation der Turbulenz der Gasphase ε_G^{Tu} existieren unterschiedliche Ansätze. Beispiele hierfür können den Arbeiten von Launder und Spalding [46], Vos [47] und Wilcox [48] entnommen werden. Jedoch beschreibt keine andere als die in Tabelle 3.7 gezeigte Definition die Dissipation vollständig. Würde die Dissipation nämlich anders definiert sein, so enthielten die resultierenden Bilanzgleichungen für die innere Energie und die Turbulenzenergie zusätzliche Terme mit unterschiedlichem Vorzeichen, die einen entsprechenden Energietransport anzeigen würden und deshalb der Dissipation angerechnet werden müssten.

3.2.2 Vereinfachung der Bilanzgleichungen der exakten Strömungsbewegung

Um den Berechnungsaufwand zu reduzieren, ist unter anderem die exakte Bewegung von Partikeln durch eine vereinfachte Bewegung abstrahiert (vgl. [49]). Hierzu ist für die Partikelphase jeder Bewegungsanteil der Superposition für sich vereinfacht:

Der Vereinfachung der Wärmebewegung von Partikeln liegt die Annahme zugrunde, dass bei einer unmittelbaren Wechselwirkung zwischen einem Molekül der Gasphase und einem Partikel die Geschwindigkeit des Partikels aufgrund seiner wesentlich größeren Masse unverändert bleibt. Der Einfluss unmittelbarer Wechselwirkungen von Partikeln untereinander ist in Kohlenstaubflammen aufgrund des geringen Volumenanteils der Partikelphase vernachlässigbar gering [50]. Folglich ist die Wärmebewegung von Partikeln gegenüber ihrer Molarbewegung vernachlässigbar, sodass ihre exakte Geschwindigkeit näherungsweise mit der Geschwindigkeit ihrer Molarbewegung übereinstimmt:

$$\mathbf{u}_{P,i} = \check{\mathbf{u}}_{P,i} + \mathbf{u}_{P,i}^* \approx \check{\mathbf{u}}_{P,i} \quad (3.26)$$

Für die Vereinfachung der Strömungsbewegung und Turbulenz der Partikel gleiche der Impuls und der Impulstransport der Strömungsbewegung der Partikel näherungsweise dem Impuls bzw. dem Impulstransport der Strömungsbewegung der Gasphase mit einer veränderten Trägheit. Die Trägheitsveränderung entspricht dem Verhältnis der Dichten beider Phasen:

$$\overline{(\rho_P u_{P,i})} \approx \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \overline{(\rho_G u_{G,i})} \quad (3.27)$$

$$\overline{(\rho_P u_{P,i} u_{P,j})} \approx \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \overline{(\rho_G u_{G,i} u_{G,j})} \quad (3.28)$$

In analoger Weise gleiche der turbulente Energietransport der Partikel dem turbulenten Energietransport der Gasphase:

$$\overline{(\rho_P(\mathbf{U}_P u_{P,j}^{**}))} \approx \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \overline{(\rho_G(\mathbf{U}_G u_{G,j}^{**}))} \quad (3.29)$$

Die erläuterte Vereinfachung der Partikelbewegung geht mit verschiedenen Folgerungen einher, mithilfe derer die Bilanzgleichungen zur Betrachtung der exakten Strömungsbewegung vereinfacht sind, und die in Anhang B.1 zusammengefasst sind. Eine Folgerung beispielweise ist, dass die Geschwindigkeit der Strömungsbewegung beider Phasen übereinstimmt, wie Gleichung (B.1) darstellt.

Es ist davon auszugehen, dass die Vereinfachungen (3.26) bis (3.29) auf den allgemeinen Kohlenstaubverbrennungsprozess zutreffen, da verschiedene Simulationen, die mit ihrer Zuhilfenahme erstellt wurden, entsprechende Messergebnisse gut wiedergeben – selbst im Brennernahbereich, in dem die größte Abweichung zu erwarten ist (vgl. [49]).

Über die Vereinfachung der Partikelbewegung hinaus bestehen weitere Vereinfachungen. So sei der Einfluss der Dissipation der Strömungsbewegung und Turbulenz beider Phasen auf die innere Energie beider Phasen vernachlässigbar gering:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} [(\bar{\rho}_G \tilde{U}_G + \bar{\rho}_P \tilde{U}_P) \tilde{u}_{G,j}] - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Sb} - \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Sb} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} - \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Tu} \\ \approx \frac{\partial}{\partial x_j} [(\bar{\rho}_G \tilde{U}_G + \bar{\rho}_P \tilde{U}_P) \tilde{u}_{G,j}] \end{aligned} \quad (3.30)$$

Auch die Interaktion zwischen der Gas- und Partikelphase ist vereinfacht. So sei zum einen der Einfluss der Nahwirkung von Partikeln auf den konvektiven Transport der inneren Energie der Gasphase über die zeit-räumlichen Skalen der Turbulenz vernachlässigbar gering

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_G \tilde{U}_G \tilde{u}_{G,j}] - \bar{\rho}_G \overline{(\mathbf{f}_{G,i}^* \mathbf{u}_{G,i}^*)} \approx \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_G \tilde{U}_G \tilde{u}_{G,j}] \quad (3.31)$$

und zum anderen die Summe der dichtegewichteten, umwandlungsinduzierten Dissipationen vernachlässigbar gering:

$$\bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} = \frac{1}{2} \overline{(u_{G,i} u_{G,i} - u_{P,i} u_{P,i}) \sum_{b(g)} [S_{M,b}]} \approx 0 \quad (3.32)$$

Zwecks besserer Lesbarkeit der Bilanzgleichungen sind einige phasenspezifische Größen in suspensionsspezifische Größen überführt. Suspensionsspezifische Größen enthalten keinen Index zur Kennzeichnung ihres Bezuges auf die Suspension. Die Definition jeder suspensionsspezifischen Größe ist in der nachstehenden Tabelle dargestellt.

Tabelle 3.8: Definition suspensionsspezifischer Größen

Größe	Definition
Dichte	$\bar{\rho} = \bar{\rho}_G + \bar{\rho}_P$
Massenanteil eines Bestandteils der Gasphase	$\tilde{x}_b = \frac{\bar{\rho}_G \tilde{x}_{G,b}}{\bar{\rho}}$
Massenanteil eines Bestandteils der Partikelphase	$\tilde{x}_b = \frac{\bar{\rho}_P \tilde{x}_{P,b}}{\bar{\rho}}$
Geschwindigkeit der Translation	$\tilde{u}_j = \tilde{u}_{G,j}$
Innere Energie	$\tilde{U} = \frac{\bar{\rho}_G \tilde{U}_G + \bar{\rho}_P \tilde{U}_P}{\bar{\rho}}$
Strahlungsquellterm	$\bar{S}_{Str} = \bar{S}_{Str,G} + \bar{S}_{Str,P}$

Über die Vereinfachungen hinaus ist die Änderung der inneren Energie in einen thermischen und einen chemischen Anteil unterschieden, was nach Lucas [51] für die Betrachtung eines Prozesses mit stofflichen Umwandlungen sinnvoll ist. Der thermische Anteil der Änderung der inneren Energie $\Delta \tilde{U}_{th}$ bezeichnet den Unterschied zwischen der inneren Energie im Strömungszustand und der inneren Energie in einem Referenzzustand \tilde{U}_{ref} . Als Referenzzustand dient der nach DIN 1343 [52] definierte Normzustand mit einer Temperatur T_{ref} von 273,15 K und einem Druck p_{ref} von 101325 Pa. Der chemische Anteil der Änderung der inneren Energie, zusammengefasst zum chemischen Quellterm \bar{S}_{chem} , entspricht der Änderung der inneren Energie aufgrund einer stofflichen Umwandlung im Referenzzustand. Die Definitionen der beiden Größen sind nachstehend dargestellt.

$$\Delta \tilde{U}_{th} = (\tilde{U} - \tilde{U}_{ref}) \quad (3.33)$$

$$\bar{S}_{chem} = -\frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} \tilde{U}_{ref}] - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{U}_{ref} \tilde{u}_j] \quad (3.34)$$

Gemäß den vorstehenden Erläuterungen gehen aus den Bilanzgleichungen zur Betrachtung der exakten Strömungsbewegung der Suspension die Bilanzgleichungen zur Betrachtung einer vereinfachten

Strömungsbewegung der Suspension hervor. Sie stellen die Bilanz des Anteils der Strömungsbewegung

- an der Masse eines Bestandteils der Gasphase,

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{x}_b \tilde{u}_j + \bar{J}_{G,b,j}^{Tu} + \bar{J}_{G,b,j}^{Wb}] = \bar{S}_{M,b} \quad (3.35)$$

- an der Masse eines Bestandteils der Partikelphase,

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{x}_b \tilde{u}_j + \bar{J}_{P,b,j}^{Tu}] = \bar{S}_{M,b} \quad (3.36)$$

- an der gesamten Masse

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_j] = 0 \quad (3.37)$$

- am gerichteten Impuls der Translation,

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb}] = g_i \bar{\rho} \quad (3.38)$$

- an der Turbulenzenergie,

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{k}_G \tilde{u}_j + \bar{\rho} (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{G,i,j}^{Wb} u_{G,i}^{**})}] = \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} G_G^{Bew} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} \quad (3.39)$$

- am thermischen Anteil der Änderung der inneren Energie,

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \cdot \Delta \tilde{U}_{th} \cdot \tilde{u}_j + \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \bar{q}_{leit,G,j}^{Tu} + \bar{q}_{leit,G,j}^{Wb}] = \bar{S}_{Str} + \bar{S}_{chem} \quad (3.40)$$

- und an der spektralen Strahlungsdichte dar.

$$\frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} = \frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} \Big|_{ems} + \frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} \Big|_{abs} + \frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} \Big|_{rfl} \quad (3.41)$$

3.3 Modellierung nicht anwendungsspezifischer Prozessmerkmale

Die Modellierung nicht anwendungsspezifischer Prozessmerkmale ist, unterschieden nach Stoffverhalten, Strömungsverhalten, Strahlungsverhalten und Umwandlungsverhalten, in den folgenden Unterkapiteln erläutert.

3.3.1 Stoffverhalten

Zur Modellierung der Größen, die das Stoffverhalten beschreiben, dienen verschiedene Stoffgesetze, die ursprünglich in der Detailtiefe der Molarbewegung formuliert wurden. Sie gelangen in einer vereinfachten Weise zur Anwendung. Die ursprüngliche und angewendete Formulierung der Stoffgesetze ist in der folgenden Tabelle gegenübergestellt und für jede zu modellierende Größe in jeweils einem der folgenden Unterkapitel erläutert.

Tabelle 3.9: Modellierung der das Stoffverhalten beschreibenden Größen

Größe	Ursprüngliche Formulierung des Stoffgesetzes	Angewendete Formulierung des Stoffgesetzes
$\bar{\rho}$	$\rho_G^M = \frac{p_G^{Wb}}{T_G} \cdot \left[\bar{R} \sum_G \left(\frac{x_{G,b}}{M_{M,b}} \right) \right]^{-1}$	$\bar{\rho} = \frac{p_{ref}}{\bar{T}_G} \cdot \left[\bar{R} \sum_G \left(\frac{\bar{x}_b}{M_{M,b}} \right) \right]^{-1}$
\tilde{T}_G	$c_G^{v,ig} \langle T_G \rangle (T_G - T_{ref}) - \Delta U_{th,G} = 0$	$c^{v,G} \langle \tilde{T}_G \rangle (\tilde{T}_G - T_{ref}) - \Delta \tilde{U}_{th}^G = 0$
$\tilde{T}_{P,p}$	$\dot{q}_{konv,p} \langle T_{P,p} \rangle + \dot{q}_{str,p} \langle T_{P,p} \rangle + \dot{q}_{chem,p} = 0$	$\bar{q}_{konv,p} \langle \tilde{T}_{P,p} \rangle + \bar{q}_{str,p} \langle \tilde{T}_{P,p} \rangle + \bar{q}_{chem,p} = 0$
$\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb}$	$\sigma_{G,i,j}^{Wb} = -\tau_{G,i,j}^{Wb} + \delta_{ij} (p_G^{Wb} + \sigma_{korrr,G}^{Wb})$ mit $\tau_{G,i,j}^{Wb} = \mu_G^{ig} \left(\frac{\partial u_{G,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{G,j}}{\partial x_i} \right)$ $\sigma_{korrr,G}^{Wb} = \frac{2}{3} \mu_G^{ig} \frac{\partial u_{G,k}}{\partial x_k}$	$\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb} = -\bar{\tau}_{G,i,j}^{Wb} + \delta_{ij} (\bar{p}_G^{Wb} + \bar{\sigma}_{korrr,G}^{Wb})$ mit $\bar{\tau}_{G,i,j}^{Wb} = \mu_G^{ig} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$ $\bar{\sigma}_{korrr,G}^{Wb} = \frac{2}{3} \mu_G^{ig} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k}$
$\dot{q}_{leit,G,j}^{Wb}$	$\dot{q}_{leit,G,j}^{Wb} = -\lambda_G^{ig} \frac{\partial T_G}{\partial x_j}$	$\bar{q}_{leit,G,j}^{Wb} = -\frac{\mu_G^{ig} \cdot \kappa_G}{Pr_G^{Wb}} \cdot \frac{\partial \Delta \tilde{U}_{th}}{\partial x_j}$
$j_{G,b,j}^{Wb}$	$j_{G,b,j}^{Wb} = -\rho_G^M D_{G,b}^{ig} \frac{\partial x_{G,b}}{\partial x_j}$	$\bar{j}_{G,b,j}^{Wb} = -\frac{\mu_G^{ig}}{Pr_G^{Wb}} \cdot \frac{\partial \bar{x}_b}{\partial x_j}$

Die Modellierung des Stoffverhaltens unterliegt vier übergreifenden Vereinfachungen, die in jeweils einem der folgenden Absätze beschrieben sind.

Mögliche Kovarianzen von Schwankungsanteilen der Turbulenz innerhalb eines jeden Stoffgesetzes seien vernachlässigbar gering.

Der Anteil der Strömungsbewegung an jedem Stoffwert gleiche näherungsweise dem Stoffwert im Zustand der Strömungsbewegung.

Das Stoffverhalten der realen Gasphase gleiche dem Verhalten eines idealen Gases, was der hochgestellte Index ig an den Stoffwerten symbolisiert. Ein ideales Gas ist ein Gas, dessen Verhalten dem Gesetz von Boyle-Mariotte und dem Gesetz von Gay-Lussac vollkommen folgt [31]. Wie ein ideales Gas verhält sich ein Gas umso stärker, je weiter sein Zustand vom Kondensationszustand entfernt ist [53]. Die Annahme dieses idealen Verhaltens ist für Gase mit einem Druck von weniger als 5 bar zulässig [54] und damit für die Gasphase eines Kohlenstaubfeuerungsprozesses zulässig.

Die Gasphase verhalte sich wie ein inkompressibles Gas. Inkompressibilität bezeichnet die Dominanz der Wärmebewegung gegenüber der Molarbewegung, sodass in der Detailtiefe der Molarbewegung die Gasphase durch die Molarbewegung weder verdichtet noch verdünnt wird.

Dichte der Suspension

Die Berechnung der Dichte der Suspension ρ beruht auf der Zustandsgleichung eines idealen Gases. Diese Zustandsgleichung enthält in ihrer ursprünglichen Form die Materialdichte der Gasphase ρ_G^M , wie Tabelle 3.9 zeigt. Die Materialdichte unterscheidet sich von der Dichte der Gasphase ρ_G , indem sie sich ausschließlich auf den von der Gasphase eingenommenen Raum und nicht auf den Gesamt-raum bezieht [55]. Die beiden Dichten gleichen sich beim Kohlenstaubverbrennungsprozess annähernd (vgl. [55]), da der Volumenanteil der Partikelphase vernachlässigbar gering ist [49]:

$$\rho_G \approx \rho_G^M \quad (3.42)$$

Mittels der vorstehenden Näherung ist die erwähnte Zustandsgleichung umgeformt und durch Multiplikation mit dem Verhältnis aus der Suspensionsdichte und der Gasphasendichte in die Gleichung zur Bestimmung der Suspensionsdichte überführt. In der in Tabelle 3.9 gezeigten Darstellung ist der Quotient des gasphasenspezifischen Massenanteils $x_{G,b}$ eines Bestandteils und des genannten Dichteverhältnisses zum entsprechenden suspensionsspezifischen Massenanteil \tilde{x}_b zusammengefasst.

Zur Berechnung der Suspensionsdichte erlaubt die Annahme der Inkompressibilität, anstelle des tatsächlich vorliegenden Druckes p_G^{wb} den Referenzdruck p_{ref} zu verwenden, worauf in Unterkapitel „Wärmeinduzierte Spannung“ auf Seite 29 eingegangen ist.

Temperatur der Gasphase

Die Berechnung der Gasphasentemperatur T_G basiert auf der Proportionalität, die nach Lucas [56] zwischen dem Differential der Temperatur und dem Differential des thermischen Anteils der inneren Energie besteht. Der Proportionalitätsfaktor heißt differentielle isochore Wärmekapazität der Gasphase $C_G^{v,ig}$. Der Zusammenhang trifft für ideale Gase auch bei nicht isochoren Zustandsänderungen zu [56], was seine Anwendung auf Kohlenstaubverbrennungsprozesse rechtfertigt:

$$d\Delta U_{th,G} = C_G^{v,ig} \cdot dT_G \quad (3.43)$$

Eine Integration des vorstehenden Zusammenhanges führt zur Bestimmungsgleichung für die Temperatur der Gasphase, die in ihrer ursprünglichen Formulierung die integrale isochore Wärmekapazität der Gasphase $c_G^{v,ig}$ enthält, wie Tabelle 3.9 zeigt. Dieser Stoffwert bezeichnet einen Mittelwert der differentiellen isochoren Wärmekapazität im Bereich zwischen Referenz- und Stoffzustand:

$$c_G^{v,ig} \langle T_G \rangle := \frac{1}{T_G - T_{ref}} \int_{T_{ref}}^{T_G} C_G^{v,ig} \langle T \rangle \cdot dT \quad (3.44)$$

Aufgrund eines geringeren Aufwandes für die Temperaturberechnung sind die integrale isochore Wärmekapazität der Gasphase $c_G^{v,ig}$ in den Anteil der Gasphase an der isochoren Wärmekapazität der Suspension $c^{v,G}$ und der thermische Anteil der inneren Energie der Gasphase $\Delta \tilde{U}_{th,G}$ in den Anteil der Gasphase am thermischen Anteil der inneren Energie der Suspension $\Delta \tilde{U}_{th}^G$ überführt, wie aus Tabelle 3.9 hervorgeht (vgl. [57]). Die genannten Größen unterscheiden sich in ihren Bezug auf die Gasmasse ($c_G^{v,ig}$, $\Delta \tilde{U}_{th,G}$) bzw. die Gesamtmasse ($c^{v,G}$, $\Delta \tilde{U}_{th}^G$), wie die folgenden Gleichungen zeigen.

$$c^{v,G} := \frac{\rho_G}{\rho} c_G^{v,ig} \langle \tilde{T}_G \rangle = \sum_{b(G)} [\tilde{x}_b c_b^{v,ig} \langle \tilde{T}_G \rangle] \quad (3.45)$$

$$\Delta \tilde{U}_{th}^G := \frac{\rho_G}{\rho} \Delta \tilde{U}_{th,G} = \Delta \tilde{U}_{th} - \Delta \tilde{U}_{th}^P \quad (3.46)$$

Der Anteil der Gasphase an der integralen isochoren Wärmekapazität der Suspension $c^{v,G}$ hängt vom Massenanteil und der integralen isochoren Wärmekapazität jedes Bestandteils der Gasphase ab, wie Gleichung (3.45) darstellt. Die integrale isochore Wärmekapazität jedes Bestandteils der Gasphase ist eine Funktion der Temperatur der Gasphase. Dieser Zusammenhang ist durch jeweils ein Polynom vierten Grades beschrieben, das in Anhang C erläutert ist.

Der Anteil der Gasphase am thermischen Anteil der inneren Energie der Suspension $\Delta\tilde{U}_{th}^G$ gleicht der Differenz zwischen dem thermischen Anteil der inneren Energie der Suspension und dem entsprechenden Anteil der Partikelphase $\Delta\tilde{U}_{th}^P$, wie Gleichung (3.46) zeigt. Der Anteil der Partikelphase am thermischen Anteil der inneren Energie der Suspension geht aus der Temperatur der Partikel $\tilde{T}_{P,p}$, ihrer Zusammensetzung und den spezifischen integralen Wärmekapazitäten c_b hervor:

$$\Delta\tilde{U}_{th}^P = \sum_p [\sum_{b(P)} [\tilde{x}_b \cdot c_b \langle \tilde{T}_{P,p} \rangle \cdot (\tilde{T}_{P,p} - T_{ref})]] \quad (3.47)$$

Die Berechnung der Wärmekapazität der partikelförmigen Bestandteile ist in Anhang C erklärt.

Die Temperatur der Gasphase ist mit der resultierenden Gleichung analytisch nicht berechenbar. Der hierdurch erforderliche Einsatz eines numerischen Verfahrens ist in Unterkapitel 5.4 beschrieben.

Temperatur der Partikel

Die Temperatur der Partikel einer Klasse $\tilde{T}_{P,p}$ geht aus einer Energiebilanz über die äußere Oberfläche der entsprechenden Partikel hervor. Der Summe eines oberflächenspezifischen Wärmestroms aufgrund des Strahlungswärmeaustausches $\dot{q}_{Str,p}$, eines oberflächenspezifischen Wärmestroms aufgrund von Konvektion $\dot{q}_{konv,p}$ und einer entsprechend modellierten oberflächenspezifischen Energieänderung aufgrund stofflicher Umwandlungen innerhalb der Partikel $\dot{q}_{chem,p}$ steht die zeitliche Änderung der inneren Energie der Partikel gegenüber. Bei Kohlenstaubverbrennungsprozessen ändert sich die innere Energie der Partikel so schnell, dass der hierfür stehende Term fast jederzeit den Wert null annimmt. Somit sind bei Eulerscher Betrachtungsweise der Partikelphase die genannten Wärmeströme näherungsweise überall im Gleichgewicht: [57]

$$\bar{q}_{Str,p} + \bar{q}_{konv,p} + \bar{q}_{chem,p} \approx 0 \quad (3.48)$$

Der oberflächenspezifische Wärmestrom aufgrund des Strahlungsaustausches zwischen den Partikeln und der Gasphase setzt sich aus einem Anteil der Emission und einem Anteil der Absorption

zusammen. Der Anteil der Emission ist eine Funktion der Partikeltemperatur, der Stefan-Boltzmann-Konstanten σ und des Emissionsgrads der Partikel (vgl. [58]), der einen konstanten Wert von 0,85 annahme. Der Anteil der Absorption gleicht dem Produkt des Absorptionskoeffizienten der Partikel und der mittleren, auf die Partikel fallenden Strahlungsenergie, die dem Produkt der mittleren, gerichteten Strahlungsdichte und der Kreiszahl π entspricht. Die Berechnung der mittleren, gerichteten Strahlungsdichte erfolgt unter der Annahme, die Gasphase sei ein diffuser Strahler. Für ein diffus strahlendes Gas gleicht die mittlere, gerichtete Strahlungsdichte dem auf die Oberfläche der Einheitskugel bezogenen Integral der gerichteten Strahlungsdichte über die Einheitskugel. Der Absorptionsgrad der Partikel gleiche vereinfachend ihrem Emissionsgrad. Dementsprechend gilt für die Wärmestromdichte aufgrund des Strahlungsaustausches folgende Berechnungsgleichung.

$$\bar{q}_{Str,p} = 0,85 \left(\pi \frac{\int_{4\pi} \left[\int_{\lambda=1\mu m}^{\lambda=1000\mu m} [L_{\lambda,x}] \cdot d\lambda \right] \cdot d\Omega}{4\pi} - \sigma \tilde{T}_{P,p}^4 \right) \quad (3.49)$$

Der oberflächenspezifische Wärmestrom aufgrund von Konvektion ist einem empirischen Ansatz nach eine Funktion des mittleren Wärmeübergangskoeffizienten in der Partikelgrenzschicht $\alpha_{GS,p}$ und der Differenz zwischen Gas- und Partikeltemperatur:

$$\bar{q}_{konv,p} = \alpha_{GS,p} (\tilde{T}_G - \tilde{T}_{P,p}) \quad (3.50)$$

Der mittlere Wärmeübergangskoeffizient in der Partikelgrenzschicht ist eine Funktion der entsprechenden Nusseltzahl Nu_{GS} und Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{GS,p}$ sowie des mittleren Partikeldurchmessers $\bar{D}_{P,p}$, dessen Modellierung in Unterkapitel 3.3.4 erläutert ist:

$$\alpha_{GS,p} = \frac{Nu_{GS} \cdot \lambda_{GS,p} (\tilde{T}_{GS,p})}{\bar{D}_{P,p}} \quad (3.51)$$

Die Nusseltzahl des Wärmeübergangs zwischen der Gasphase und den Partikeln in einer Kohlenstaubflamme nimmt einen Wert von zwei an [59]. Dies ist mit demjenigen Wärmeübergangsgesetz im Einklang, das den Wärmeübergang für eine umströmte Kugel bei unendlich kleiner Relativgeschwindigkeit zwischen Kugel und Umströmungsmedium beschreibt (vgl. [60]). Die Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit in der Partikelgrenzschicht erfolgt mittels einer anwendungsspezifischen Funktion, die in Unterkapitel 4.3 beschrieben ist. Die Temperatur der Partikelgrenzschicht gleiche dem arithmetischen Mittelwert zwischen Gas- und Partikeltemperatur:

$$\tilde{T}_{Gs,p} \approx \frac{\tilde{T}_G + \tilde{T}_{P,p}}{2} \quad (3.52)$$

Eine Energieänderung der Partikel wegen stofflicher Umwandlungen ist auf die Trocknung der mineralstofffreien Kohlesubstanz oder die Umwandlung der mineralstofffreien Kokssubstanz zurückzuführen. Der entsprechende fiktive oberflächenspezifische Wärmestrom ist eine Funktion von brutoreaktionsspezifischen Größen (siehe Unterkapitel 3.3.4), der auf die Suspensionsmasse bezogenen äußeren Partikeloberfläche $\bar{a}_{P,p}$ (siehe Unterkapitel 3.3.4) und der Suspensionsdichte:

$$\bar{q}_{chem,p} = \frac{\Delta U_{Rea,0,p} \cdot \bar{m}_{Rea,0,p} + \Delta U_{Rea,II,p} \cdot \bar{m}_{Rea,II,p}}{\bar{a}_{P,p} \bar{\rho}} \quad (3.53)$$

Die Bestimmung der Partikeltemperatur mittels der den vorstehenden Erläuterungen entsprechenden Energiebilanz ist ausschließlich numerisch möglich und folglich in Unterkapitel 5.4 erläutert.

Wärmeinduzierte Spannung

Die wärmeinduzierte Spannung der Gasphase $\sigma_{G,i,j}^{Wb}$ ist wie bei Maxwell [36] in drei Anteile unterschieden: die richtungsabhängige Schubspannung $\tau_{G,i,j}^{Wb}$, den richtungsunabhängigen, mittleren wärmeinduzierten Druck der Gasphase p_G^{Wb} , der im allgemeinen Sprachgebrauch als Druck bezeichnet wird, und die Spannungskorrektur $\sigma_{korrr,G}^{Wb}$, deren Bezeichnung auf ihre Bedeutung als Differenz zwischen der tatsächlichen Spannung und den beiden anderen Anteilen hinweist.

Die wärmeinduzierte Schubspannung $\tau_{G,i,j}^{Wb}$ sei über die dynamische Viskosität der Gasphase μ_G^{ig} den entsprechenden Geschwindigkeitsgradienten proportional [36], wie Tabelle 3.9 zeigt. Die dynamische Viskosität hängt von der Zusammensetzung der Gasphase und der dynamischen Viskosität der einzelnen Bestandteile ab (vgl. [61] [62]). Dieser Zusammenhang ist vereinfacht berücksichtigt, wie in Unterkapitel 4.3 beschrieben ist.

Der Druck ist ein Maß für die spezifische Energie der Wärmebewegung. Die Molarbewegung der Moleküle der Gasphase kann zu einer Änderung des Druckes führen, obwohl die Molarbewegung gemäß der Inkompressibilität der Gasphase diese weder verdichten noch verdünnen kann. Folglich sind das Differential des Druckes und das Differential der Dichte in einem sich inkompressibel verhaltenden Gas nicht gekoppelt. Dies rechtfertigt die Nutzung des Referenzdruckes zur Bestimmung der Suspensionsdichte. Für den Druck existiert keine Bestimmungsgleichung, weswegen das

resultierende Gleichungssystem mithilfe eines auf den Bilanzgleichungen (3.37) und (3.38) basierenden Druckkorrekturverfahrens umgeformt ist (siehe Unterkapitel 5.4).

Die Spannungskorrektur sei gemäß der Hypothese von Stokes modelliert (vgl. [36] [63]).

Wärmeinduzierte Wärmeleitung

Die Berechnung der wärmeinduzierten Wärmeleitung $\dot{q}_{leit,G,j}^{Wb}$ basiert auf dem Fourierschen Gesetz. In seiner ursprünglichen Formulierung enthält es die Wärmeleitfähigkeit der Gasphase λ_G^{ig} . Dieser Stoffwert ist auf die gasphasenspezifischen Größen dynamische Viskosität, differentielle isochore Wärmekapazität, Isentropenexponent κ_G und wärmeinduzierte Prandtlzahl Pr_G^{Wb} zurückgeführt:

$$\lambda_G^{ig} = \frac{\mu_G^{ig} \cdot c_G^{v,ig} \cdot \kappa_G}{Pr_G^{Wb}} \quad (3.54)$$

Vereinfachend seien die wärmeinduzierte Prandtlzahl und der Isentropenexponent mit jeweils einer anwendungsspezifischen Konstanten bedacht, deren Festlegung in Unterkapitel 4.3 dargelegt ist.

In Hinblick auf ein standardisiertes Vorgehen bei der Lösung des resultierenden Gleichungssystems gleiche das Differential des thermischen Anteils der inneren Energie der Gasphase $\partial\Delta\tilde{U}_{th,G}$ dem Differential des thermischen Anteils der inneren Energie der Suspension $\partial\Delta\tilde{U}_{th}$ (vgl. Gleichung (3.46)):

$$\partial\Delta\tilde{U}_{th,G} \approx \partial\Delta\tilde{U}_{th} \quad (3.55)$$

Wärmeinduzierte Massendiffusion

Zur Modellierung der wärmeinduzierten Massendiffusion der Gasphase $j_{G,b,j}^{Wb}$ dient das erste Ficksche Gesetz. Der in seiner ursprünglichen Formulierung enthaltene Diffusionskoeffizient $D_{G,b}^{ig}$ hängt von der dynamischen Viskosität und Materialdichte der Gasphase sowie der bestandteilspezifischen, wärmeinduzierten Schmidtzahl $Sc_{G,b}^{Wb}$ ab. Die wärmeinduzierte Schmidtzahl und die wärmeinduzierte Prandtlzahl stimmen in Gasen näherungsweise überein [64] und sind deswegen einander gleichgesetzt:

$$D_{G,b}^{ig} = \mu_G^{ig} (\bar{\rho}_G^M \cdot Sc_{G,b}^{Wb})^{-1} \approx \mu_G^{ig} (\bar{\rho}_G^M \cdot Pr_G^{Wb})^{-1} \quad (3.56)$$

Für die Modellierung der wärmeinduzierten und turbulenzinduzierten Massendiffusion gelte für das Differential eines gasphasenspezifischen Massenanteils $\partial \tilde{x}_{G,b}$ die nachstehende Vereinfachung.

$$\partial \tilde{x}_{G,b} = \partial \left[\frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \tilde{x}_b \right] \approx \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \partial \tilde{x}_b \quad (3.57)$$

Weiterhin sei für die Berechnung der wärmeinduzierten Massendiffusion das Dichteverhältnis in der vorstehenden Gleichung vernachlässigt. Aufgrund dessen werden im Vergleich zur realen wärmeinduzierten Massendiffusion kleinere Werte für die wärmeinduzierte Massendiffusion der gasförmigen Bestandteile berechnet. Hierdurch würde eine zusätzliche Relativbewegung zwischen Gas- und Partikelphase induziert. Diesem Umstand ist begegnet, indem den Partikeln eine analog modellierte wärmeinduzierte Massendiffusion aufgeprägt ist:

$$\bar{j}_{P,b,j}^{wb} := - \frac{\mu_G^{ig}}{Pr_G^{wb}} \cdot \frac{\partial \tilde{x}_b}{\partial x_j} \quad (3.58)$$

3.3.2 Strömungsverhalten

Die Modellierung des Strömungsverhaltens umfasst eine Modellierung der turbulenzinduzierten Größen Spannung, Wärmeleitung und Massendiffusion, eine Modellierung der turbulenzinduzierten Konvektion und Diffusion von Turbulenzenergie und eine Modellierung der Dissipation der Turbulenz der Gasphase. Die angewendeten Modellierungsansätze stellen zusammengefasst eine Variante der Standard k - ε -Modelle dar. Die abgeleiteten Bilanzgleichungen für die Turbulenzenergie \tilde{k}_G und die Dissipation der Turbulenz ε_G^{Tu} unterscheiden sich von den entsprechenden Bilanzgleichungen bekannter Standard k - ε -Modelle, beispielsweise demjenigen von Launder und Spalding [46], von Vos [47] oder von Wilcox [48]. Die Ursache hierfür ist die abweichende Definition der Turbulenz der Gasphase, worauf in Unterkapitel 3.2.1 eingegangen ist. Die Modellierung des Strömungsverhaltens ist der erwähnten Unterscheidung nach in den folgenden Unterkapiteln beschrieben.

Turbulenzinduzierte Spannung, Wärmeleitung und Massendiffusion

Auf Basis der formalen Analogie zwischen Wärmebewegung und Turbulenz (vgl. Unterkapitel 3.2.1) modellierte Boussinesq [65] die turbulenzinduzierte Spannung $\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu}$ in einer zur Modellierung der wärmeinduzierten Spannung $\bar{\sigma}_{G,i,j}^{wb}$ formal gleichen Weise [66] [67]. Das entsprechende

Strömungsgesetz enthält statt der dynamischen Viskosität der Gasphase μ_G^{ig} die dynamische Wirbelviskosität der Gasphase μ_G^{Tu} . Die turbulenzinduzierte Wärmeleitung $\bar{q}_{leit,G,j}^{Tu}$ und Massendiffusion $\bar{J}_{Ph,b,j}^{Tu}$ können analog modelliert werden [68]. Diese Strömungsgesetze finden Anwendung, indem sie zunächst für die in Unterkapitel 3.2.2 beschriebene Betrachtung einer vereinfachten Strömungsbewegung und das in Unterkapitel 3.3.1 erläuterte Stoffverhalten spezifiziert und anschließend vereinfacht sind, so wie es in Tabelle 3.10 zusammengefasst und nachfolgend erklärt ist.

Tabelle 3.10: Modellierung des Strömungsverhaltens

Größe	Ursprüngliche Formulierung des Strömungsgesetzes	Angewendete Formulierung des Strömungsgesetzes
$\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu}$	$\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} = -\bar{\tau}_{G,i,j}^{Tu} + \delta_{ij}(\bar{p}_G^{Tu} + \bar{\sigma}_{G,Korr}^{Tu})$	$\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} = -\bar{\tau}_{G,i,j}^{Tu} + \delta_{ij}(\bar{p}_G^{Tu} + \bar{\sigma}_{G,Korr}^{Tu})$
	mit	mit
	$\bar{\tau}_{G,i,j}^{Tu} = \mu_G^{Tu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_{G,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_{G,j}}{\partial x_i} \right)$	$\bar{\tau}_{G,i,j}^{Tu} = \mu_G^{Tu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$
	$\bar{p}_G^{Tu} = \frac{2}{3} \bar{\rho}_G^M \tilde{k}_G$	$\bar{p}_G^{Tu} = \frac{2}{3} \bar{\rho}_G \tilde{k}_G$
	$\bar{\sigma}_{G,Korr}^{Tu} = \frac{2}{3} \mu_G^{Tu} \frac{\partial \tilde{u}_{G,k}}{\partial x_k}$	$\bar{\sigma}_{G,Korr}^{Tu} = \frac{2}{3} \mu_G^{Tu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}$
$\bar{q}_{leit,G,j}^{Tu}$	$\bar{q}_{leit,G,j}^{Tu} = -\lambda_G^{Tu} \frac{\partial \tilde{T}_G}{\partial x_j}$	$\bar{q}_{leit,G,j}^{Tu} = -\frac{\mu_G^{Tu} \cdot \kappa_G}{Pr_G^{Tu}} \cdot \frac{\partial \Delta \tilde{U}_{th}}{\partial x_j}$
$\bar{J}_{Ph,b,j}^{Tu}$	$\bar{J}_{G,b,j}^{Tu} = -\rho_G^M D_{G,b}^{Tu} \frac{\partial x_{G,b}}{\partial x_j}$	$\bar{J}_{Ph,b,j}^{Tu} = -\frac{\mu_G^{Tu}}{Pr_G^{Tu}} \cdot \frac{\partial \tilde{x}_b}{\partial x_j}$

Zur Berechnung der Wirbelviskosität der Gasphase μ_G^{Tu} dient bei Standard k - ε -Modellen folgender Zusammenhang (vgl. [69]).

$$\mu_G^{Tu} = 0,09 \bar{\rho}_G \frac{\tilde{k}_G^2}{\varepsilon_G^{Tu}} \quad (3.59)$$

Die vorstehende Gleichung geht auf Prandtl [70] [71] zurück, der aufgrund der formalen Analogie zwischen Wärmebewegung und Turbulenz darauf schloss, dass die dynamische Wirbelviskosität der Gasphase μ_G^{Tu} sich näherungsweise proportional zur Dichte der Gasphase, zum Mischungsweg der Turbulenz L^{Tu} und zur Wurzel der Turbulenzenergie der Gasphase verhält:

$$\mu_G^{Tu} \propto \bar{\rho}_G L^{Tu} \tilde{k}_G^{0,5} \quad (3.60)$$

Der Mischungsweg der Turbulenz L^{Tu} beschreibt eine mittlere Größe der turbulenten Strukturen. Sein Analogon ist der Mischungsweg der Wärmebewegung, der nach Maxwell [72] dem mittleren Abstand zwischen den Molekülen eines Gases entspricht. Der Mischungsweg und die Dissipation der Turbulenz der Gasphase seien keine unmittelbaren Funktionen von Stoffwerten der Wärmebewegung, sondern ausschließlich unmittelbar von der Turbulenz beeinflusste, einander proportionale Größen, woraus Taylor [73] durch eine Dimensionsanalyse folgenden Zusammenhang ableitete (vgl. [74]).

$$L^{Tu} \propto \frac{\tilde{k}_G^{1,5}}{\varepsilon_G^{Tu}} \quad (3.61)$$

Der Modellierungsansatz für die turbulenzinduzierte Wärmeleitung enthält die Wirbelwärmeleitfähigkeit der Gasphase λ_G^{Tu} . In analoger Weise zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit λ_G^{ig} , dargestellt in Gleichung (3.54), ist die Wirbelwärmeleitfähigkeit der Gasphase eine Funktion der Wirbelviskosität μ_G^{Tu} , der isochoren Wärmekapazität $C_G^{v,ig}$, des Isentropenexponenten κ_G und einer entsprechend definierten Wirbel-Prandtlzahl der Gasphase Pr_G^{Tu} :

$$\lambda_G^{Tu} = \frac{\mu_G^{Tu} \cdot C_G^{v,ig} \cdot \kappa_G}{Pr_G^{Tu}} \quad (3.62)$$

Die Wirbel-Prandtlzahl der Gasphase nehme einen Wert von 0,70 an (vgl. [50]).

Auch der zur Modellierung der turbulenzinduzierten Massendiffusion erforderliche Wirbeldiffusionskoeffizient eines Bestandteils der Gasphase $D_{G,b}^{Tu}$ ist wie sein Analogon berücksichtigt: dem Diffusionskoeffizienten $D_{G,b}^{ig}$, berechnet nach Gleichung (3.56). Der Wirbeldiffusionskoeffizient hängt von der Wirbelviskosität μ_G^{Tu} , der Materialdichte $\bar{\rho}_G^M$ und einer bestandteilspezifischen Wirbel-Schmidtzahl der Gasphase $Sc_{G,b}^{Tu}$ ab. Die Wirbel-Schmidtzahl gleiche aufgrund der formalen Analogie zwischen Turbulenz und Wärmebewegung der Wirbel-Prandtlzahl:

$$D_{G,b}^{Tu} = \mu_G^{Tu} (\bar{\rho}_G^M \cdot Sc_{G,b}^{Tu})^{-1} \approx \mu_G^{Tu} (\bar{\rho}_G^M \cdot Pr_G^{Tu})^{-1} \quad (3.63)$$

Die Massendiffusion partikelförmiger Bestandteile $\tilde{j}_{P,b,j}^{Tu}$ ist durch jeweils einen zur Massendiffusion gasförmiger Bestandteile $\tilde{j}_{G,b,j}^{Tu}$ analogen Ansatz erfasst.

Einige Terme des resultierenden Gleichungssystems enthalten das Produkt der Wirbelviskosität der Gasphase und des Quotienten aus der Dichte der Suspension und der Dichte der Gasphase. Diese Größen sind zur Wirbelviskosität der Suspension μ^{Tu} zusammengefasst:

$$\mu^{Tu} = \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \mu_G^{Tu} \quad (3.64)$$

Bei der Anwendung der vorstehenden Strömungsgesetze kann eine fehlerhafte Berücksichtigung der turbulenzinduzierten Größen nicht ausgeschlossen werden. Beispielsweise kann die turbulenzinduzierte Massendiffusion auch entgegen des entsprechenden Gradienten verlaufen [75], was einen negativen Wert der per Definition positiven Wirbelviskosität erfordern würde. Derartige Fehler sind darin begründet, dass die angewendeten Strömungsgesetze auf der formalen Analogie zwischen Wärmebewegung und Turbulenz und nicht auf physikalischen Gesetzen basieren. Dies unterscheidet die Strömungsgesetze von den Stoffgesetzen. So kann nach Maxwell [72] beispielsweise die dynamische Viskosität μ_G^{ig} auf Basis der molekularen Bewegung berechnet werden. Weiterhin stellt die Isotropie der Wirbelviskosität der Gasphase eine nicht allgemeingültige Vereinfachung dar (vgl. [76]). Insbesondere kann nach Jones [77] die Wirbelviskosität der Gasphase in einer Strömung mit einem gekrümmten Strömungsverlauf eine nicht isotrope Größe sein [78].

Turbulenzinduzierte Konvektion und Diffusion von Turbulenzenergie

Die turbulenzinduzierte Konvektion $\bar{\rho}(k_G \widetilde{u_{G,j}^{**}})$ und Diffusion $\overline{(\sigma_{G,i,j}^{Wb} u_{G,i}^{**})}$ von Turbulenzenergie sind nicht unmittelbar modelliert. Sie unterliegen zunächst einigen Umformungen, sodass die Bilanzgleichung für die Turbulenzenergie die nachstehend dargestellte Form annimmt, wie in Anhang B.2 dargelegt ist.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{k}_G \tilde{u}_j + \bar{\rho} (k_G \widetilde{u_{G,j}^{**}}) + \overline{((p_G^{Wb})'' u_{G,j}^{**})} \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\mu_G^{ig} \frac{\partial \bar{k}_G}{\partial x_j} - \mu_G^{ig} \overline{\left(\frac{\partial u_{G,j}^{**}}{\partial x_i} u_{G,i}^{**} \right)} + \frac{2}{3} \mu_G^{ig} \overline{\left(\frac{\partial u_{G,k}^{**}}{\partial x_k} u_{G,j}^{**} \right)} \right] \\ & = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\sigma_{G,i,j}^{Wb} (u_{G,i}^{**})} \right] - \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \overline{\sigma_{G,i,j}^{Tu}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} \end{aligned} \quad (3.65)$$

Die zu modellierenden Größen der vorstehenden Bilanzgleichung sind wie folgt berücksichtigt:

Zwischen der turbulenzinduzierten Konvektion der Turbulenzenergie $\bar{\rho}(k_G \widetilde{u_{G,j}^{**}})$ und der Definition der turbulenzinduzierten Spannung $\sigma_{G,i,j}^{Wb}$, dargestellt in Tabelle 3.6, besteht eine formale Analogie. Dies legt nahe, auch die turbulenzinduzierte Konvektion von Turbulenzenergie durch einen Gradientenansatz zu modellieren. Üblicherweise wird jedoch die Summe der turbulenzinduzierten Konvektion von Turbulenzenergie und der turbulenzinduzierten Konvektion der turbulenzinduzierten Druckschwankung $\overline{(p_G^{Wb})'' u_{G,j}^{**}}$ durch einen gemeinsamen Ansatz erfasst, da kein geeigneter Modellierungsterm für die letztgenannte Größe bekannt ist [74]. Dieser Ansatz findet in einer vereinfachten Weise Berücksichtigung, indem die turbulenzinduzierte Konvektion der turbulenzinduzierten Druckschwankung um das Verhältnis aus der Dichte der Gasphase und der Dichte der Suspension erweitert ist:

$$\bar{\rho}_G (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) + \frac{\bar{\rho}_G}{\bar{\rho}} \overline{(u_{G,j}^{**} (p_G^{Wb})'')} \approx - \frac{\mu_G^{Tu}}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}_G}{\partial x_j} \quad (3.66)$$

Die dimensionslose Kennzahl σ_k nimmt bei Standard k - ε -Modellen den Wert 1,0 an (vgl. [46]).

Zur Berücksichtigung des ersten Terms in der zweiten Zeile von Bilanzgleichung (3.65) gleiche das Differential des nicht-dichtegewichteten Anteils der Strömungsbewegung an der Turbulenzenergie dem Differential des entsprechenden dichtegewichteten Anteils. Weiterhin ergänze der Kehrwert der dimensionslosen Kennzahl σ_k den genannten Term:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_G^{ig} \frac{\partial \bar{k}_G}{\partial x_j} \right] \approx \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_G^{ig}}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}_G}{\partial x_j} \right] \quad (3.67)$$

Die übrigen Terme in der zweiten Zeile von Bilanzgleichung (3.65) seien vernachlässigbar gering:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\mu_G^{ig} \overline{\left(\frac{\partial u_{G,j}^{**}}{\partial x_i} u_{G,i}^{**} \right)} + \frac{2}{3} \mu_G^{ig} \overline{\left(\frac{\partial u_{G,k}^{**}}{\partial x_k} u_{G,j}^{**} \right)} \right] \approx 0 \quad (3.68)$$

Die Modellierung des Anteils der Strömungsbewegung an der turbulenten Geschwindigkeitsfluktuation $\overline{(u_{G,j}^{**})}$ geht auf einen von Hogg [79] beschriebenen Ansatz zurück:

$$\overline{(u_{G,i}^{**})} \approx \frac{\mu_G^{Tu}}{\bar{\rho}_G^2} \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho}_G] \quad (3.69)$$

Dissipation der Turbulenz der Gasphase

Die exakte Bilanzgleichung für die Dissipation der Turbulenz ε_G^{Tu} geht aus der Impulsbilanzgleichung hervor (vgl. [80]). Beinahe jeder Term dieser exakten Bilanzgleichung erfordert eine problematische Modellierung (vgl. [81]). Deswegen wird die Dissipation ε_G^{Tu} mithilfe einer vereinfachten Form dieser Bilanzgleichung berechnet, die der Bilanzgleichung für die Turbulenzenergie \tilde{k}_G ähnelt: Statt der Konvektion und Diffusion der Turbulenzenergie \tilde{k}_G enthält die Bilanzgleichung entsprechende Ausdrücke für die Konvektion und Diffusion der Dissipation ε_G^{Tu} (vgl. [81]). Die übrigen Terme der Bilanzgleichung für die Turbulenzenergie der Gasphase sind mit jeweils einer Konstanten und dem Verhältnis aus der Dissipation ε_G^{Tu} und der Turbulenzenergie \tilde{k}_G multipliziert [81]. Die den Erläuterungen dieses Unterkapitels nach abgeleiteten Bilanzgleichungen für die Turbulenzenergie \tilde{k}_G und die Dissipation der Turbulenz ε_G^{Tu} sind nachfolgend dargestellt.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{k}_G \tilde{u}_j - \frac{\mu^{eff}}{\sigma_k} \cdot \frac{\partial \tilde{k}_G}{\partial x_j} \right] \\ &= - \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb} \frac{\mu_G^{Tu}}{\bar{\rho}_G^2} \frac{\partial \bar{\rho}_G}{\partial x_i} \right] + \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} \right) \end{aligned} \quad (3.70)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \varepsilon_G^{Tu} \tilde{u}_j - \frac{\mu^{eff}}{\sigma_\varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon_G^{Tu}}{\partial x_j} \right] \\ &= - \left(1,44 \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb} \frac{\mu_G^{Tu}}{\bar{\rho}_G^2} \frac{\partial \bar{\rho}_G}{\partial x_i} \right] + 1,44 \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + 1,92 \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} \right) \frac{\varepsilon_G^{Tu}}{\tilde{k}_G} \end{aligned} \quad (3.71)$$

Die vorstehenden Bilanzgleichungen enthalten die effektive dynamische Viskosität μ^{eff} , die als Summe der Wirbelviskosität und der dynamischen Viskosität der Gasphase definiert ist.

$$\mu^{eff} := \mu^{Tu} + \mu_G^{ig} \quad (3.72)$$

Die dimensionslose Kennzahl σ_ε nimmt bei Standard k - ε -Modellen den Wert 1,3 an (vgl. [46]).

3.3.3 Strahlungsverhalten

Die Modellierung des Strahlungsverhaltens erfordert die Modellierung der absorptions-, emissions- und reflektionsbedingten Änderung der spektralen Strahlungsdichte jedes Wärmestrahlungsfeldes. Die Grundlage hierfür bildet die Beschreibung des exakten Strahlungsverhaltens eines Gases in der

Detailtiefe der Molarbewegung, in der beispielsweise Kirchhoff [82] die Eigenschaften von Körpern zur Emission und Absorption von Wärmestrahlung beschrieb. Das exakte Strahlungsverhalten eines Gases ist in einer vereinfachenden Weise auf das Strahlungsverhalten der Suspension übertragen.

Exaktes Strahlungsverhalten eines Gases

Die Änderung der spektralen Strahlungsdichte jedes Wärmestrahlungsfeldes aufgrund einer entsprechenden Absorption durch ein Gas steht in einem proportionalen Zusammenhang zur spektralen Strahlungsdichte [83]. Die Proportionalitätskonstante heißt spektraler Absorptionskoeffizient $k_{abs,G,\lambda}$:

$$\frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{abs,G} = -k_{abs,G,\lambda} \cdot L_{\lambda,x} \quad (3.73)$$

Die spektrale Strahlungsdichte der Wärmestrahlung, die von einem Körper emittiert werden kann, ist nach oben begrenzt. Ein Körper, der über das gesamte Wärmestrahlungsspektrum und in jede Richtung Strahlung mit maximaler Energie emittiert, heißt schwarzer Körper. Die spektrale Strahlungsdichte der von Gasen emittierten Wärmestrahlung gleicht je nach Wellenlänge und Richtung unterschiedlich stark der Strahlungsenergie eines schwarzen Körpers. Mit der Emission von Wärmestrahlung geht eine Änderung der Strahlungsdichte einher, die über den spektralen Absorptionskoeffizienten der maximal emittierbaren spektralen Strahlungsdichte $L_{max,\lambda,x}$ proportional ist [83]:

$$\frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{ems,G} = k_{abs,G,\lambda} \cdot L_{max,\lambda,x} \quad (3.74)$$

Planck [84] leitete für die maximal emittierbare spektrale Strahlungsdichte eine Berechnungsgleichung her, die nur unter der Voraussetzung des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts gültig ist [38]. Vom Zustand des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts an jeder zeit-räumlichen Stelle ist auszugehen, wie in Unterkapitel 3.2.1 erläutert ist. Dies rechtfertigt die Nutzung der von Planck [84] hergeleiteten Berechnungsgleichung. Die maximal emittierbare spektrale Strahlungsdichte ist nach Planck [84] eine Funktion der Temperatur des strahlenden Körpers und der Wellenlänge des Strahlungsfeldes, wie es die nachfolgende Gleichung darstellt, in der c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum, h_{Pl} die Planck-Konstante und k_{Bo} die Boltzmann-Konstante symbolisieren [85].

$$L_{max,\lambda,x} = \frac{2 \cdot c^2 \cdot h_{Pl}}{\lambda^5} \left[\exp\left(\frac{h_{Pl} \cdot c}{k_{Bo} \cdot \lambda \cdot T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (3.75)$$

Die Verteilung der maximal emittierbaren spektralen Strahlungsdichte gemäß der Planckschen Berechnungsgleichung ist in der folgenden Abbildung für verschiedene Temperaturen ϑ veranschaulicht.

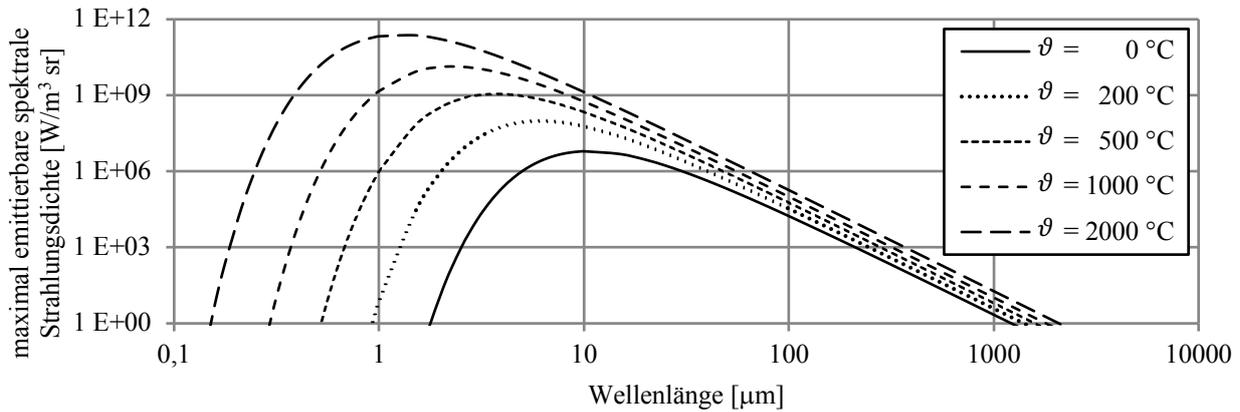


Abbildung 3-2: Maximal emittierbare spektrale Strahlungsdichte

Die vorstehende Abbildung verdeutlicht, dass die maximal emittierbare spektrale Strahlungsdichte für eine bestimmte Wellenlänge einen maximalen Wert annimmt, von dem aus sie monoton fallend verläuft. Mit zunehmender Temperatur des strahlenden Körpers erhöht sich die maximal emittierbare spektrale Strahlungsdichte über das gesamte Spektrum, wobei sich das Maximum zu einer geringeren Wellenlänge verschiebt.

Eine Reflexion von Wärmestrahlung kann mit einer Änderung der Wellenlänge einhergehen, was als unelastische Reflexion bezeichnet wird [86]. Die Auswirkung der unelastischen Reflexion auf einen Kohlenstaubverbrennungsprozess ist vernachlässigbar gering (vgl. [86]).

Die elastische Reflexion von Wärmestrahlung ist in einer vergleichbaren Weise zur Emission und Absorption mithilfe des spektralen Reflexionskoeffizienten $k_{rfl,G,\lambda}$ quantitativ beschrieben. Die elastische Reflexion von Strahlung kann durch Einstreuung zu einer Erhöhung und durch eine Ausstreuung zu einer Erniedrigung der spektralen Strahlungsdichte führen. Die einstreungsbedingte Erhöhung der spektralen Strahlungsdichte hängt von der Wahrscheinlichkeit ab, dass Strahlung aus einer beliebigen Richtung x_1 in die Richtung der betrachteten Strahlung reflektiert wird. Diese Wahrscheinlichkeit wird Phasenfunktion $\Phi_{\lambda,x_1,x}$ genannt. Somit gilt für die reflexionsbedingte Änderung der spektralen Strahlungsdichte der folgende Zusammenhang.

$$\left. \frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \right|_{rfl,G} = -k_{rfl,G,\lambda} \cdot L_{\lambda,x} + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} [k_{rfl,G,\lambda} \cdot \Phi_{\lambda,x_1,x} \cdot L_{\lambda,x}] \cdot d\Omega \quad (3.76)$$

Vereinfachtes Strahlungsverhalten der Suspension

Das exakte Strahlungsverhalten eines Gases ist wie folgt auf das Strahlungsverhalten der Suspension übertragen:

- Eine hinreichend genaue Berechnung eines Kohlenstaubverbrennungsprozesses erfordert nicht, die Wärmestrahlung wellenlängenspezifisch zu beschreiben. Es reicht aus, die Wärmestrahlung durch jeweils eine Strahlungsdichte je Raumrichtung, die sogenannte Strahlungsintensität I_x , mit einem entsprechend definierten mittleren Absorptionskoeffizient der Suspension k_{abs} zu beschreiben:

$$k_{abs} \cdot I_x := \int_{\lambda=1\mu m}^{\lambda=1000\mu m} [k_{abs,\lambda} \cdot L_{\lambda,x}] \cdot d\lambda \quad (3.77)$$

- Der mittlere Absorptionskoeffizient der Suspension k_{abs} setze sich additiv aus den Absorptionskoeffizienten der Gasphase und der Partikelphase zusammen [87]:

$$k_{abs} \approx k_{abs,G} + \sum_p [k_{abs,P,p}] \quad (3.78)$$

Insbesondere der Absorptionskoeffizient der Gasphase ist ein anwendungsspezifischer Parameter, da er nicht nur vom Zustand des Gases, sondern auch von der Form des Raumes abhängt. Vor diesem Hintergrund ist die Berechnung der Absorptionskoeffizienten in Unterkapitel 4.4 erläutert.

- In Konsequenz der Definition (3.77) gilt für das Integral über das Wärmestrahlungsspektrum derjenigen Änderung der spektralen Strahlungsdichte, die auf eine Emission der Gasphase zurückzuführen ist, folgender Zusammenhang (vgl. [88]):

$$\int_{\lambda=1\mu m}^{\lambda=1000\mu m} \left[\frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{ems,G} \right] \cdot d\lambda = k_{abs,G} \cdot \frac{\sigma}{\pi} T_G^4 \quad (3.79)$$

- Für die Modellierung der Wärmestrahlungsemission durch die Partikel stimme ihre Temperatur mit der Temperatur der Gasphase überein [89]:

$$\int_{\lambda=1\mu m}^{\lambda=1000\mu m} \left[\frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{ems,P} \right] \cdot d\lambda \approx \sum_p \left[k_{abs,P,p} \cdot \frac{\sigma}{\pi} T_G^4 \right] \quad (3.80)$$

- Die Änderung der spektralen Strahlungsdichte aufgrund der Reflexion von Wärmestrahlung an den Molekülen der Gasphase sei in Anlehnung an Baehr und Stephan [90] vernachlässigbar

gering gegenüber der Änderung aufgrund der entsprechenden Absorption. Die Änderung der spektralen Strahlungsdichte aufgrund der Reflexion von Wärmestrahlung an den unterschiedlichen Partikeln sei vereinfachend ebenfalls vernachlässigt:

$$\frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{abs} + \frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{rfl} \approx \frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{abs} \quad (3.81)$$

- Die Modellierung des Strahlungsverhaltens unterliege der Vernachlässigung möglicher Kovarianzen von Schwankungsanteilen der Turbulenz.

Entsprechend den vorstehenden Erläuterungen dieses Unterkapitels sind der in Tabelle 3.8 definierte Strahlungsquellterm, die Bilanzgleichung für die spektrale Strahlungsdichte (3.41) und der Strahlungswärmeaustausch zwischen Gas- und Partikelphase nach Gleichung (3.49) umgeformt, wie nachstehend in der genannten Reihenfolge dargestellt ist.

$$\bar{S}_{Str} = - \int_{4\pi} \left[\frac{d}{dx} \bar{I}_x \right] \cdot d\Omega \quad (3.82)$$

$$\frac{d}{dx} \bar{I}_x = k_{abs} \cdot \left(\frac{\sigma}{\pi} \tilde{T}_G^4 - \bar{I}_x \right) \quad (3.83)$$

$$\bar{q}_{Str,p} = 0,85 \left(\pi \frac{\int_{4\pi} [\bar{I}_x] \cdot d\Omega}{4\pi} - \sigma \tilde{T}_{P,p}^4 \right) \quad (3.84)$$

Für den Strahlungsquellterm gilt unter Berücksichtigung der Bilanzgleichung für die gerichtete Strahlungsintensität der folgende Ausdruck.

$$\bar{S}_{Str} = \int_{4\pi} [\bar{k}_{abs} \bar{I}_x] \cdot d\Omega - 4\bar{k}_{abs} \sigma \tilde{T}_G^4 \quad (3.85)$$

Das Differential nach der Raumrichtung in der Bilanzgleichung für die gerichtete Strahlungsintensität ist in das Differential ∂x_j und den Richtungskosinus Γ_j jeder Koordinatenrichtung überführt [91]:

$$\Gamma_j \langle x \rangle \cdot \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{I}_x = \bar{k}_{abs} \left(\frac{\sigma}{\pi} \tilde{T}_G^4 - \bar{I}_x \right) \quad (3.86)$$

Zwischen jedem Richtungskosinus und der Raumrichtung x besteht ein geometrischer Zusammenhang, den beispielsweise Schneider [91] erläutert.

3.3.4 Umwandlungsverhalten

Den Bilanzgleichungen (3.35) bis (3.41) gemäß können stoffliche Umwandlungen die Verteilung der Massenanteile und des thermischen Anteils der inneren Energie unmittelbar beeinflussen. Die Modellierung der entsprechenden Quellterme basiert auf einer Abstraktion der umwandlungsrelevanten Teilprozesse durch fiktive, mit dem Index r nummerierte Bruttoreaktionen. Jede Bruttoreaktion stellt eine Zusammenfassung realer Elementarreaktionen oder einen Phasenübergang dar. Die Zuordnung der Bruttoreaktionen auf die umwandlungsrelevanten Teilprozesse zeigt Tabelle 3.11.

Tabelle 3.11: Übersicht Bruttoreaktionen

umwandlungsrelevanter Teilprozess	Index r
Trocknung der mineralstofffreien Kohlesubstanz	0_p
Primärpyrolyse der mineralstoff- und wasserfreien Kohlesubstanz	I_p
Sekundärpyrolyse der Teerstoffe	VII, IX
Abbrand von Bestandteilen der Gasphase	III, IV, V, VI, VIII
Umwandlung der mineralstofffreien Kokssubstanz	II_p

In welcher Weise die Bestandteile sich ineinander umwandeln, veranschaulicht Abbildung 3-3.

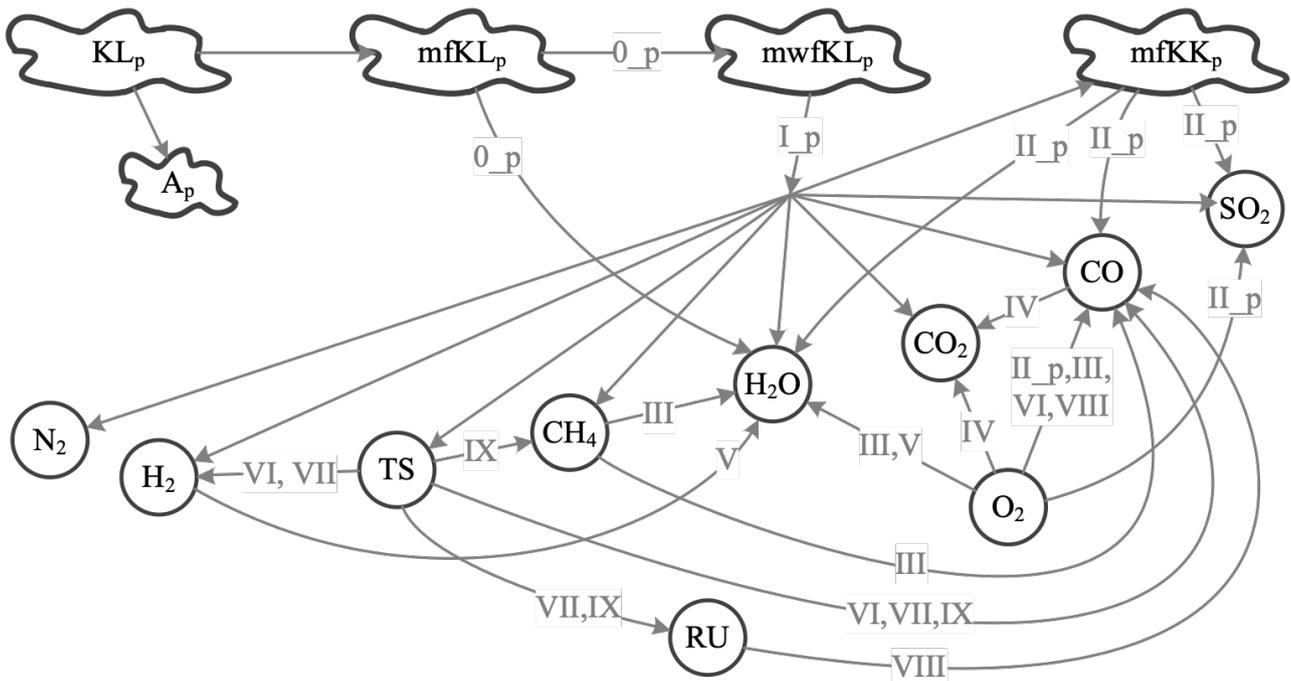


Abbildung 3-3: Übersicht über die stofflichen Umwandlungen

Wie aus Tabelle 3.11 und Abbildung 3-3 hervorgeht, ist die Umwandlung von Mineralstoffen in Asche vereinfachend erfasst, indem die Kohle mittels einer entsprechenden Randbedingung am Eintritt in den Feuerraum in mineralstofffreie Kohlesubstanz und Asche unterschieden wird.

Zur quantitativen Beschreibung einer jeden Bruttoreaktion dienen die stöchiometrischen Koeffizienten $\nu_{r,b}$ der an der Bruttoreaktion beteiligten Bestandteile, die Reaktionsenergie $\Delta U_{Rea,r}$ und die Reaktionsgeschwindigkeit $\dot{m}_{Rea,r}$. Aus diesen Größen gehen die auf den unmittelbaren Einfluss stofflicher Umwandlungsprozesse zurückzuführenden Quellterme wie folgt hervor.

$$\bar{S}_{M,b} = \sum_r [\nu_{r,b} \cdot \bar{m}_{Rea,r}] \quad (3.87)$$

$$\bar{S}_{chem} = - \sum_r [\Delta U_{Rea,r} \cdot \bar{m}_{Rea,r}] \quad (3.88)$$

Die Modellierung der bruttoreaktionsbeschreibenden Größen unterliegt folgenden Randbedingungen:

- Die Bestimmung der stöchiometrischen Koeffizienten erfolgt unter der Prämisse, dass die an einer Bruttoreaktion beteiligten Elemente oder Stoffe über die Bruttoreaktion hinweg erhalten bleiben, sofern es im Folgenden nicht anders erwähnt ist.
- Die Reaktionsenergie ist eine Funktion der Reaktionsenthalpie $\Delta h_{Rea,r}$ und der Volumenänderungsarbeit, die bei einem idealen Gas von der Stoffmengenänderung der gasförmigen Bestandteile abhängt (vgl. [92] [8]):

$$\Delta U_{Rea,r} = \Delta h_{Rea,r} - \sum_{b(G)} \left[\frac{\nu_{r,b}}{M_{M,b}} \tilde{R} T_{ref} \right] \quad (3.89)$$

- Die Reaktionsenthalpie nimmt für exotherme Reaktionen einen negativen Wert an. Sie ist eine Funktion des Heizwertes im Referenzzustand $H_{u,b}$ (siehe Tabelle 1.1 & Tabelle C.2) jedes an der Reaktion beteiligten Stoffes:

$$\Delta h_{Rea,r} = \sum_b [\nu_{r,b} H_{u,b}] \quad (3.90)$$

Die Energiebilanz des Gesamtprozesses ist in Anhang D auf ihre Bestimmtheit überprüft. Die Modellierung der bruttoreaktionsbeschreibenden Größen eines jeden umwandlungsrelevanten Teilprozesses und die entsprechende Berechnung der Partikelgröße ist in jeweils einem der folgenden Unterkapitel erläutert.

Trocknung der mineralstofffreien Kohlesubstanz

Zur Trocknungs-Modellierung dient jeweils eine Bruttoreaktion je Partikelklasse, in der aus der mineralstofffreien Kohlesubstanz mineralstoff- und wasserfreie Kohlesubstanz und Wasser hervorgehen:



Die Bindungsenergie von Wasser in der Partikelstruktur sei so gering, dass die Reaktionsenthalpie dem negativen Produkt des stöchiometrischen Koeffizienten von Wasser und der Verdampfungsenthalpie von Wasser im Referenzzustand gleiche. Letztere beträgt $2501,3 \text{ kJ/kg}$ [93].

Die Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit basiert auf einer Beschreibung der Trocknung als Wasserdampfdiffusion durch die Partikelgrenzschicht. Gemäß einem empirischen Ansatz gleicht die Diffusionsgeschwindigkeit dem Produkt des Stoffübergangskoeffizienten $\beta_{H_2O,p}$ und der Differenz zwischen dem Wassermassenanteil an der äußeren Partikeloberfläche $\tilde{x}_{H_2O}^{A,p}$ und in der Gasphase. Dementsprechend lautet die Berechnungsgleichung für die Reaktionsgeschwindigkeit wie folgt, wobei $\bar{a}_{p,p}$ die äußere Partikeloberfläche darstellt, wie auf Seite 54 erläutert ist.

$$\bar{m}_{Rea,0,p} = \beta_{H_2O,p} \cdot (\tilde{x}_{G,H_2O}^{A,p} - \tilde{x}_{G,H_2O}) \cdot \bar{a}_{p,p} \bar{\rho} \cdot \frac{1}{v_{0,p,H_2O}} \quad (3.91)$$

Der Stoffübergangskoeffizient einer Grenzschichtdiffusion in Gasen gleicht nach einer Analogie zwischen Wärme- und Stoffübertragung näherungsweise dem Quotienten des mittleren Wärmeübergangskoeffizienten, berechnet nach Gleichung (3.51), und der isobaren Wärmekapazität in der Grenzschicht (vgl. [64] [94]). Die isobare Wärmekapazität gleiche vereinfachend der isobaren Wärmekapazität von Luft bei einer Temperatur von $100 \text{ }^\circ\text{C}$, die $1012 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$ beträgt:

$$\beta_{H_2O,p} \approx \frac{\alpha_{Gs,p}}{1012} \quad (3.92)$$

Der Wassermassenanteil an der äußeren Partikeloberfläche gleiche prinzipiell dem Wassermassenanteil im Sättigungszustand, sodass unter der Voraussetzung einer sich ideal und inkompressibel verhaltenden Gasphase der nachstehende Zusammenhang Berücksichtigung findet. Der erforderliche Wasserdampfdruck im Sättigungszustand $\bar{p}_{H_2O}^{Sat}$ ist nach VDI-Wärmeatlas [95] modelliert.

$$\tilde{x}_{G,H_2O}^{A,p} = \frac{\bar{p}_{H_2O}^{Sat}(\bar{T}_P)}{p_{ref}} \sum_{b(G)} \left(\frac{M_{M,H_2O} \cdot \tilde{x}_{G,b}}{M_{M,b}} \right) \quad (3.93)$$

Darüber hinaus hängt der Wassermassenanteil an der äußeren Partikeloberfläche vom hygroskopischen Verhalten der Kohle ab. Hygroskopizität bezeichnet eine Senkung des Dampfdruckes in den Poren und damit auch an der äußeren Oberfläche eines Stoffes [96], deren Ursache eine Absenkung der Oberflächenspannung des adsorbierten Wassers aufgrund seiner in den Poren konkav nach außen gekrümmten Oberfläche ist [97]. Infolge des hygroskopischen Verhaltens eines Stoffes kann seine Trocknung gehemmt sein, bevor der Stoff vollständig trocken oder die Umgebung mit Wasserdampf gesättigt ist. Das hygroskopische Verhalten von Kohle ist durch die zwei nachstehenden Abbildungen veranschaulicht. Diese stellen die Beladung, definiert als Quotient von Wassermasse und wasserfreier Kohlemasse, von Rheinischer Braunkohle bei verschiedenen Temperaturen und von Steinkohlen mit verschiedenen Gehalten an Flüchtigen nach DIN 51720 [6] dar.

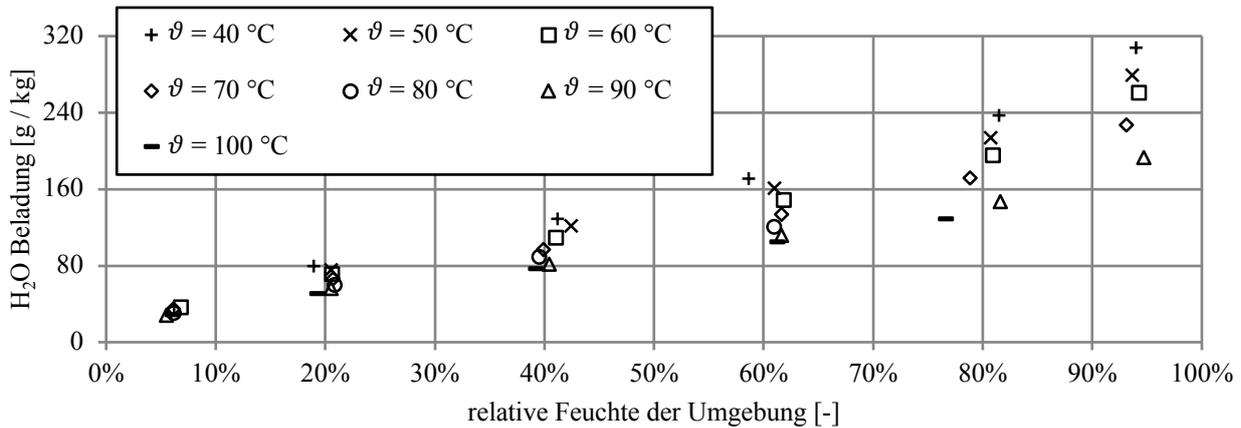


Abbildung 3-4: Gleichgewichtsfeuchte Rheinischer Braunkohle ($x_{FB} = 54,0\%$) [98]

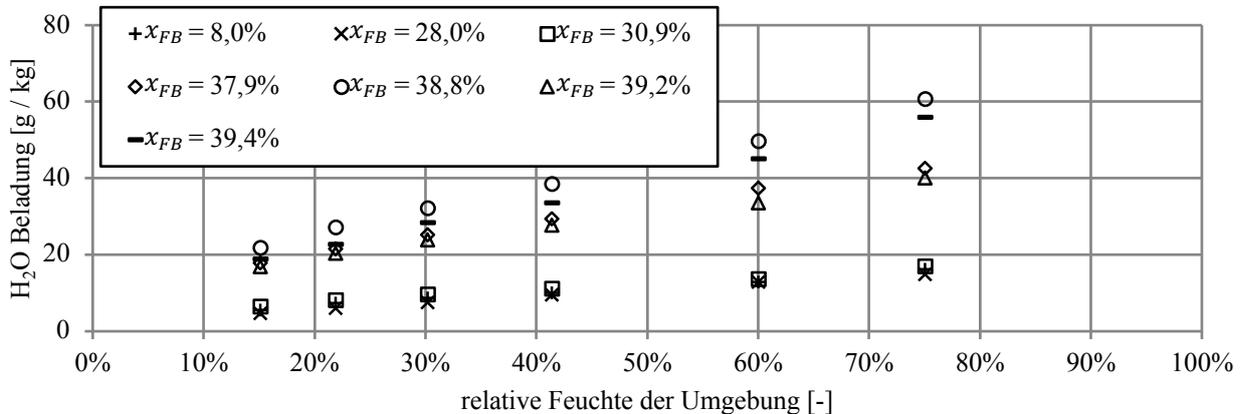


Abbildung 3-5: Gleichgewichtsfeuchte verschiedener Steinkohlen ($\vartheta = 40^\circ C$) [99]

Der Einfluss des hygroskopischen Verhaltens auf die Reaktionsgeschwindigkeit ist vereinfachend durch eine obere Grenze für die Reaktionsgeschwindigkeit berücksichtigt. Diese obere Grenze

gleiche dem Produkt der Differenz zwischen der tatsächlichen Beladung $x_{P,H2O}$ und der Beladung im Gleichgewichtszustand $x_{P,H2O}^{Ggw}$, des Massenstroms an wasserfreier Kohlesubstanz über eine infinitesimale Weglänge ∂x_j und des Kehrwertes des entsprechenden stöchiometrischen Koeffizienten:

$$\bar{m}_{Rea,0,p}^{max} \approx (x_{P,H2O} - x_{P,H2O}^{Ggw}) \cdot \frac{\tilde{x}_{wfKL,p} \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} \cdot \frac{1}{v_{0,p,H2O}} \quad (3.94)$$

Die Berechnung der Gleichgewichtsfeuchte ist in Anhang C erläutert.

Der Massenanteil an wasserfreier Kohlesubstanz $\tilde{x}_{wfKL,p}$ ist wie folgt eine Funktion der Massenanteile an mineralstofffreier Kohlesubstanz $\tilde{x}_{mfKL,p}$, an mineralstoff- und wasserfreier Kohlesubstanz $\tilde{x}_{mwfKL,p}$ und an mineralstofffreiem Koks $\tilde{x}_{mfKK,p}$.

$$\tilde{x}_{wfKL,p} \approx \left[\tilde{x}_{mfKL,p} + \left(\tilde{x}_{mwfKL,p} + \frac{\tilde{x}_{mfKK,p}}{v_{I,p,mfKK,p}} \right) \frac{1}{v_{0,p,mwfKL,p}} \right] \frac{1 - x_{KL,p,H2O}}{1 - x_{KL,p,A}} \quad (3.95)$$

Primärpyrolyse der mineralstoff- und wasserfreien Kohlesubstanz

Im Verlauf der Primärpyrolyse ändert sich die Zusammensetzung ihrer Produkte [11]. Die Auswirkung dessen auf den Gesamtprozess sei vernachlässigbar gering, weswegen die Primärpyrolyse durch jeweils eine Bruttoreaktion je Partikelklasse abstrahiert ist: Hiernach zersetze sich mineralstoff- und wasserfreie Kohlesubstanz in mineralstofffreie Kokssubstanz, Teerstoffe und verschiedene Primär-gase [100], wie im Folgenden näher erläutert.

Die mineralstofffreie Kokssubstanz bestehe überwiegend aus Kohlenstoff. Ferner enthalte sie Schwefel, wobei vereinfachend vom in einer Steinkohle enthaltenen Schwefel 70 Gew.-%, bei Braunkohle 30 Gew.-%, im Koks verbleiben (vgl. [101]). Weitere Bestandteile seien auf Basis der Arbeit von Tan [102] Wasserstoff und Sauerstoff. Tan [102] analysierte die Zusammensetzung von Koksen, die sie in einem Ofen durch die Pyrolyse von Kohlen verschiedenen Inkohlungsgrades bei einem Temperaturgradienten von 3 K/min mit unterschiedlichen Endtemperaturen gewann. Eine höhere Aufheizgeschwindigkeit kann zu einer Zunahme der Flüchtigen führen [103] und sich auf die Koks-zusammensetzung prinzipiell wie eine höhere Endtemperatur auswirken. Die Zusammensetzung von Koksen verschiedener Kohlen im Bereich zwischen Anthrazit- und Braunkohle nach Tan [102] ist nachstehend veranschaulicht. Auf der Grundlage dieser Diagramme betrage der Massenanteil von Wasserstoff und Sauerstoff in der mineralstofffreien Kokssubstanz jeweils 1 %.

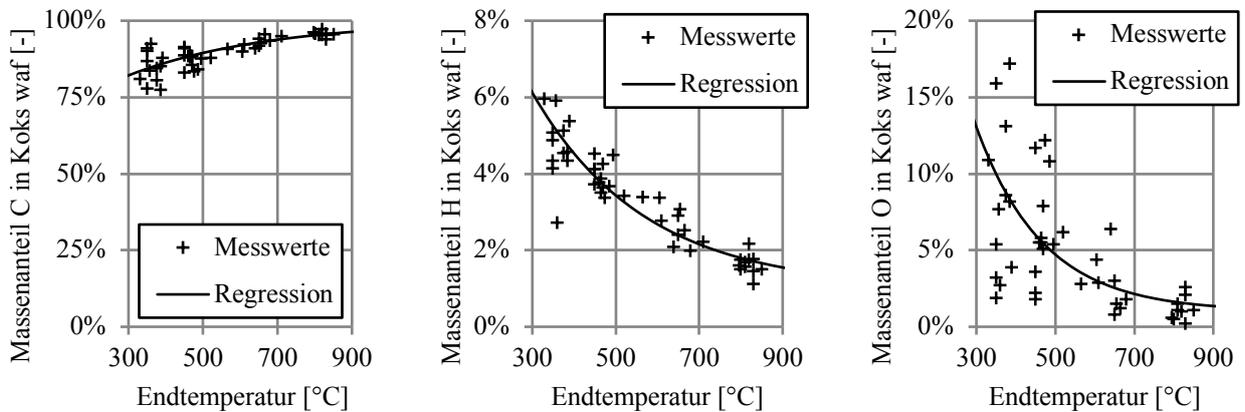


Abbildung 3-6: Zusammensetzung von Koks [102]

Reale Teerstoffe bestehen überwiegend aus Kohlenstoff, Wasserstoff und Sauerstoff [102]. Sie sind gemäß der Erläuterung dieses Absatzes als $C_{23,808}H_{33,331}O_{1,9046}$ -Moleküle abstrahiert. Diese Abstraktion fußt zum einen auf der Arbeit von Tan [104]. Diese bestimmte die Zusammensetzung von Teerstoffen aus Kohlen unterschiedlichen Inkohlungsgrades, wie Abbildung 3-7 und Abbildung 3-8 veranschaulichen. Hierbei beruht der Unterschied zwischen verschiedenen Messpunkten bei gleichem Inkohlungsgrad auf unterschiedlichen Endtemperaturen der Pyrolyse. Das molare Wasserstoff-Kohlenstoff-Verhältnis der Teerstoffe nehme einen mittleren Wert von 1,40 und das molare Sauerstoff-Kohlenstoff-Verhältnis einen mittleren Wert von 0,08 an. Zum anderen basiert die Abstraktion der Teerstoffe auf der Untersuchung der massengemittelten molaren Masse von Teerstoffen verschiedener Kohlen mittels unterschiedlicher Messverfahren von Fletcher et al. [105], gezeigt in Abbildung 3-9. Auf Basis dessen betrage die molare Masse der Teerstoffe 350 kg/kmol .

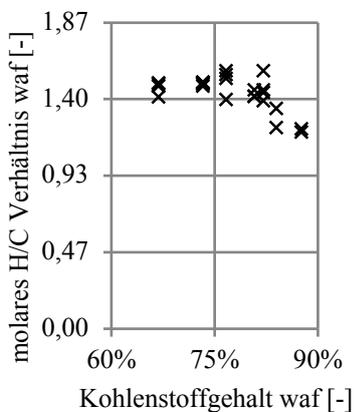


Abbildung 3-7: Teerstoff-Zusammensetzung [104]

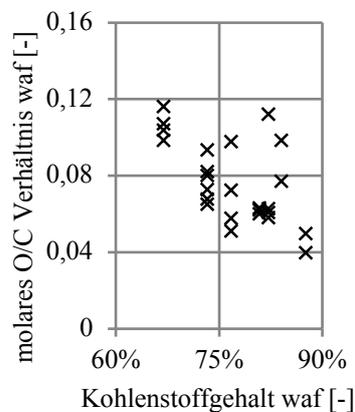


Abbildung 3-8: Teerstoff-Zusammensetzung [104]

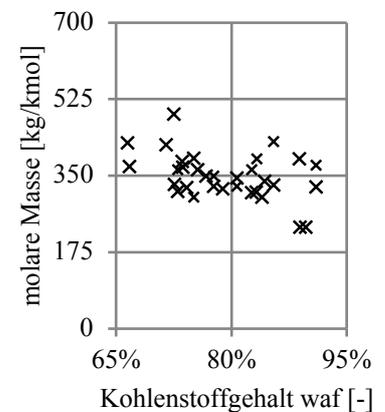


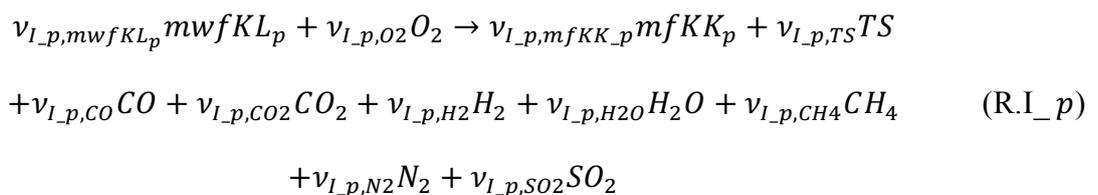
Abbildung 3-9: massengemittelte molare Masse von Teerstoffen [105]

Die Primärgase sind durch die vorwiegend entweichenden Gase abstrahiert. Hierzu zählen Kohlenstoffmonoxid, Kohlenstoffdioxid, Wasserstoff, Wasser und leichte aliphatische Verbindungen, die als Methan modelliert sind. Der Freisetzung des in der Kohle enthaltenen Stickstoffs und Schwefels ist, wie nachfolgend beschrieben, auf vereinfachte Weise Rechnung getragen, da die Umwandlung dieser Elemente in der Gasphase nicht im Fokus dieser Arbeit steht.

Der in der Kohle enthaltene Stickstoff kann während der Primärpyrolyse einerseits in gasförmigen Cyan- und Aminverbindungen entweichen oder andererseits in Koks, Ruß und Teerstoffen gebunden bleiben, woraus im weiteren Umwandlungsverlauf verschiedene Stickstoffwasserstoffradikale hervorgehen können [106]. Aus den stickstoffenthaltenen Verbindungen bleiben überwiegend molekularer Stickstoff und verschiedene Stickstoffoxide als stabile Produkte bestehen. Da sowohl der Einfluss dieser Stickstoffumwandlung auf den Gesamtprozess als auch der Massenanteil der Stickstoffoxide vernachlässigbar gering sind, werde vereinfachend der gesamte, in der mineralstoff- und wasserfreien Kohlesubstanz enthaltene Stickstoff während der Primärpyrolyse als molekularer Stickstoff freigesetzt.

Der nicht in den Partikeln gebundene Schwefel entweicht während der Primärpyrolyse überwiegend in gasförmigen Schwefelwasserstoff, der in der Gasphase mit Sauerstoff zu Schwefeldioxid und Wasser reagiert [101]. Der Einfluss dieser Schwefelumwandlung auf den Gesamtprozess und der Massenanteil an Schwefelwasserstoff sind vernachlässigbar gering, sodass vereinfachend der nicht in der mineralstofffreien Kokssubstanz gebundene Schwefel während der Primärpyrolyse unmittelbar mit Sauerstoff zu Schwefeldioxid reagiert. Der hierzu nötige Sauerstoff stamme aus der Gasphase und ist dementsprechend ein Edukt der entsprechenden Bruttoreaktion.

Gemäß der vorstehenden Erläuterung dieses Unterkapitels lautet die die Primärpyrolyse beschreibende Bruttoreaktion wie folgt, wobei der Sauerstoff auf der Eduktseite ausschließlich zur Bildung von Schwefeldioxid dient.



Der stöchiometrische Koeffizient jedes an der Bruttoreaktion beteiligten Bestandteils ist eine anwendungsspezifische Eigenschaft, deren Modellierung in Unterkapitel 4.5 beschrieben ist.

Die Geschwindigkeit der Bruttoreaktion (R.I_p) ist durch einen Arrheniusansatz erfasst, dessen Parameter für Steinkohle der Arbeit von Badzioch und Hawksley [107] und für Braunkohle der Arbeit von Hamor et al. [108] entnommen sind [109]:

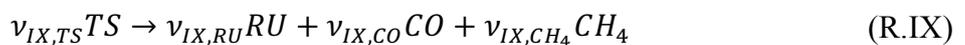
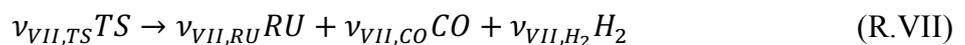
$$\bar{m}_{Rea,I_p} = 1,50 \cdot 10^5 \cdot \exp\left(-\frac{8900}{\bar{T}_{P,p}}\right) \cdot \frac{\tilde{x}_{mwfKL-p}}{-v_{I-p,mwfKL-p}} \cdot \bar{\rho} \quad \text{für Steinkohle} \quad (3.96)$$

$$\bar{m}_{Rea,I_p} = 3,15 \cdot 10^5 \cdot \exp\left(-\frac{8900}{\bar{T}_{P,p}}\right) \cdot \frac{\tilde{x}_{mwfKL-p}}{-v_{I-p,mwfKL-p}} \cdot \bar{\rho} \quad \text{für Braunkohle} \quad (3.97)$$

Die Reaktionsenthalpie der eigentlichen Primärpyrolyse sei vernachlässigbar gering. Diese Annahme traf auch Förtsch [110], der sie mit der nicht eindeutigen Datenlage begründete, nach der die Primärpyrolyse sowohl als exotherme wie auch als endotherme Reaktion beschrieben worden ist. Folglich gleiche die Reaktionsenthalpie der Bruttoreaktion (R.I_p) derjenigen Enthalpie, die während des Teilprozesses durch die Bildung des entsprechenden Schwefeldioxids frei wird. Unter diesen Randbedingungen folgt aus Gleichung (3.90) der Heizwert der mineralstofffreien Kokssubstanz.

Sekundärpyrolyse der Teerstoffe

Die Vorgänge der Sekundärpyrolyse sind für einen Hoch- und Niedertemperaturbereich durch jeweils eine Bruttoreaktion modelliert [111], wobei die leichten Kohlenwasserstoffe der Niedertemperaturbereichsreaktion als Methan abstrahiert sind und Ruß ausschließlich aus Kohlenstoff bestehe.



Die Geschwindigkeit beider Bruttoreaktionen ist durch jeweils einen Arrheniusansatz modelliert, dessen Parameter für die Hochtemperaturbereichsreaktion (R.VII) der Arbeit von Ma [17] und für die Niedertemperaturbereichsreaktion (R.IX) der Arbeit von Serio et al. [16] entnommen sind [112]:

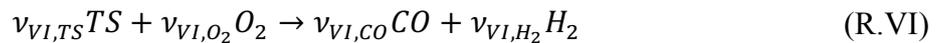
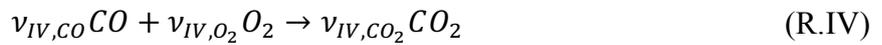
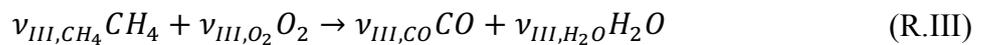
$$\bar{m}_{Rea,VII} = 5,02 \cdot 10^8 \cdot \exp\left(-\frac{24000}{\bar{T}_G}\right) \cdot \frac{\tilde{x}_{TS}}{-v_{VII,TS}} \cdot \bar{\rho} \quad (3.98)$$

$$\bar{m}_{Rea,IX} = 5,42 \cdot 10^4 \cdot \exp\left(-\frac{12000}{\bar{T}_G}\right) \cdot \frac{\tilde{x}_{TS}}{-v_{IX,TS}} \cdot \bar{\rho} \quad (3.99)$$

Die Reaktionsenthalpie im Niedertemperaturbereich (R.IX) sei vernachlässigbar gering. Unter dieser Annahme und den weiteren Randbedingungen der Modellierung der stofflichen Umwandlungsprozesse folgt der Heizwert der Teerstoffe aus Gleichung (3.90).

Abbrand von Bestandteilen der Gasphase

Die Verbrennung von Gasen ist durch jeweils eine Bruttoreaktion je Bestandteil modelliert [113]:



Die Kinetik jeder vorstehenden Verbrennungsreaktion hängt davon ab, wie intensiv sich das brennbare Gas und der Sauerstoff vermischen und wie stark die entsprechenden Moleküle miteinander wechselwirken (vgl. [114]). Um diesem Umstand Rechnung zu tragen, kommt das Eddy Dissipation Concept nach Magnussen [115] zur Anwendung [116]. Hiernach unterteilt sich die Gasphase in einen Bereich des Surrounding Fluids und in einen Bereich der Fine Structures. Die Moleküle im Bereich der Fine Structures unterscheiden sich dahingehend von den Molekülen des Surrounding Fluids, dass sie ideal durchmischt sind und ihre Bewegung mit der Wärmebewegung übereinstimmt. Die Verbrennung von Gasen läuft überwiegend im Bereich der Fine Structures ab. Vor diesem Hintergrund entspricht der Anteil der Strömungsbewegung an der entsprechenden Reaktionsgeschwindigkeit $\bar{m}_{Rea,r}$ näherungsweise dem Produkt des Massenanteils aller Moleküle im Bereich der Fine Structures γ_{FS} und der entsprechenden Reaktionsgeschwindigkeit $\bar{m}_{Rea,FS,r}$ in diesem Bereich [114]:

$$\bar{m}_{Rea,r} \approx \bar{\gamma}_{FS} \cdot \bar{m}_{Rea,FS,r} \quad (3.100)$$

Für den Massenanteil der Moleküle im Fine Structures Bereich gilt die folgende Gleichung [114].

$$\bar{\gamma}_{FS} = 4,5699 \cdot \left(\frac{\nu_G \langle \bar{T}_{FS} \rangle \cdot \varepsilon^{psd}}{\bar{\kappa}_G^2} \right)^{0,5} \quad (3.101)$$

Die kinematische Viskosität der Gasphase ν_G sei anders als die dynamische Viskosität μ_G^{ig} variabel. Sie ist durch eine anwendungsspezifische Funktion approximiert, wie in Unterkapitel 4.3 erläutert ist. Die mittlere Temperatur im Fine Structures Bereich \tilde{T}_{FS} gleiche der mittleren Temperatur der Gasphase.

Im Bereich der Fine Structures sind Reaktionen aufgrund der idealen Durchmischung ausschließlich kinetisch limitiert. Ihre Geschwindigkeit ist durch jeweils einen Arrheniusansatz erfasst, dessen Parameter der Reihenfolge der Bruttoreaktionen nach den Arbeiten von Zimont und Trushin [117], Howard et al. [118], Förtsch [113] und Shaw et al. [119] entnommen sind [113]:

$$\bar{m}_{Rea,FS,III} = 7,28 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(-\frac{20131}{\tilde{T}_{FS}}\right) \cdot \sqrt{\tilde{T}_{FS}} \cdot \frac{\tilde{x}_{FS,CH_4} \cdot \tilde{x}_{FS,O_2}}{-\nu_{III,CH_4}} \cdot \bar{\rho}_G^2 \quad (3.102)$$

$$\bar{m}_{Rea,FS,IV} = 5,42 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(-\frac{15098}{\tilde{T}_{FS}}\right) \cdot \frac{\tilde{x}_{FS,CO} \cdot \sqrt{\tilde{x}_{FS,H_2O}} \cdot \sqrt{\tilde{x}_{FS,O_2}}}{-\nu_{IV,CO}} \cdot \bar{\rho}_G^2 \quad (3.103)$$

$$\bar{m}_{Rea,FS,V} = 1,00 \cdot 10^8 \cdot \exp\left(-\frac{1000}{\tilde{T}_{FS}}\right) \cdot \frac{\tilde{x}_{FS,H_2} \cdot \tilde{x}_{FS,O_2}}{-\nu_{V,H_2}} \cdot \bar{\rho}_G^2 \quad (3.104)$$

$$\bar{m}_{Rea,FS,VI} = 1,02 \cdot 10^6 \cdot \exp\left(-\frac{6671}{\tilde{T}_{FS}}\right) \cdot \frac{\tilde{x}_{FS,TS} \cdot \tilde{x}_{FS,O_2}}{-\nu_{VI,TS}} \cdot \bar{\rho}_G^2 \quad (3.105)$$

Der Massenanteil eines Bestandteils im Bereich der Fine Structures $\tilde{x}_{FS,b}$ unterscheidet sich vom entsprechenden Massenanteil in der Gasphase $\tilde{x}_{G,b}$ und geht aus folgender Stoffbilanz hervor [113].

$$\tilde{x}_{FS,b} = \tilde{x}_{G,b} + \frac{\bar{\tau}_{FS} \cdot (1 - \bar{Y}_{FS})}{\bar{\rho}_{FS}} \cdot \sum [\bar{m}_{Rea,FS,r} \cdot \nu_{r,b}] \quad (3.106)$$

Die mittlere Dichte in den Fine Structures stimme mit der Dichte der Gasphase überein. Die mittlere Verweildauer im Bereich der Fine Structures $\bar{\tau}_{FS}$ ist diejenige Dauer, nach der ein Turbulenzwirbel die entsprechenden Moleküle erfasst, weswegen ihre Bewegung nicht mehr ausschließlich aus der Wärmebewegung besteht und sie folglich in den Bereich des Surrounding Fluids übergehen [114]. Für die mittlere Verweildauer im Bereich der Fine Structures gilt die nachstehende Berechnungsgleichung [114].

$$\bar{\tau}_{FS} = 0,40825 \cdot \sqrt{\frac{\nu_G}{\varepsilon_{psd}}} \quad (3.107)$$

Auch Ruß kann verbrennen. Sein Abbrand ist durch eine Bruttoreaktion berücksichtigt:



Der Durchmesser von Rußpartikeln D_{RU} betrage 25 nm [17]. Aufgrund dieser Größe bildet sich während des Abbrandes von Ruß keine Grenzschicht aus [120] und die Partikel folgen selbst den kleinsten turbulenten Wirbeln. Folglich limitieren überwiegend der molekulare Mischungszustand und die eigentliche Reaktionskinetik den Abbrand von Ruß. Deswegen ist die Geschwindigkeit der Bruttoreaktion ebenfalls mithilfe des Eddy Dissipation Concepts berechnet. Die eigentliche Reaktionskinetik ist mittels eines Ansatzes von Magnussen [120] modelliert [113]:

$$\bar{m}_{Rea,Fs,VIII} = - \frac{6}{\rho_{RU} \cdot D_{RU}} \cdot \frac{2.97 \cdot 10^{-3} \cdot \bar{p}_{Fs,O_2}^2 \cdot \exp\left(\frac{-29000}{T_{Fs}}\right)}{1 + 3.02 \cdot \bar{p}_{Fs,O_2}^2 \cdot \exp\left(\frac{-29300}{T_{Fs}}\right)} \cdot \frac{\tilde{x}_{Fs,RU}}{v_{VIII,RU}} \cdot \bar{\rho}_G \quad (\text{3.108})$$

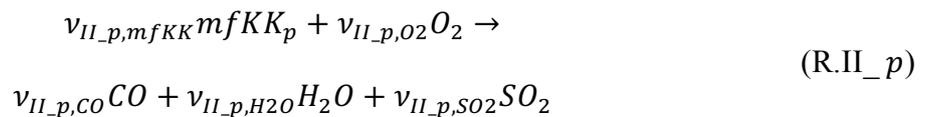
Die Moleküle im Bereich der Fine Structures mögen sich wie ein ideales Gas verhalten, sodass für den Sauerstoffpartialdruck im Bereich der Fine Structures der folgende Ausdruck gilt.

$$\bar{p}_{Fs,O_2} = \tilde{x}_{Fs,O_2} \frac{\bar{p}_{Fs} \cdot \bar{R} \cdot \bar{T}_{Fs}}{M_{M,O_2}} \quad (\text{3.109})$$

Die spezifische Oberfläche der Rußpartikel nehme einen Wert von $1,2 \cdot 10^8 \text{ m}^2/\text{kg}$ an [112]. Dies führt bei dem angenommenen Durchmesser zu einer Dichte der Rußpartikel ρ_{RU} von $2000 \text{ kg}/\text{m}^3$. Der Heizwert der Rußpartikel $H_{u,RU}$ betrage $33,90 \text{ MJ}/\text{kg}$.

Umwandlung der mineralstofffreien Kokssubstanz

Die Umwandlung der mineralstofffreien Kokssubstanz ist durch eine partikelklassenspezifische Bruttoreaktion abstrahiert, bei der kein Kohlenstoffdioxid entsteht (vgl. Unterkapitel 2.1).



Die Geschwindigkeit der Bruttoreaktion (R.II_p) ist mittels eines von Field et al. [121] erläuterten Ansatzes modelliert. Dieser Ansatz basiert auf der Annahme, der Widerstand der Porendiffusion sei dem Widerstand der Grenzschichtdiffusion gegenüber vernachlässigbar gering. So kann über die

Beschreibung der Sauerstoffdiffusion durch die Partikelgrenzschicht ebenso ein Ausdruck für die Geschwindigkeit des Koksabbrandes abgeleitet werden (Gleichung (3.115)) wie über die Beschreibung der Reaktionskinetik (Gleichung (3.111)). Beide Ausdrücke enthalten den an der äußeren Partikeloberfläche vorliegenden Sauerstoffpartialdruck. Der zur Berechnung genutzte Ansatz für die Geschwindigkeit des Koksabbrandes enthält diese Größe nicht, da er aus der Gleichheit beider Ausdrücke entsprechend abgeleitet ist (vgl. [121]):

$$\bar{m}_{Rea,II_p} = R_{II_p} \left[\left(\bar{p}_{O_2} + \left(\frac{0,5R_{II_p}}{C_{II_p}\beta_{O_2,p}} \right)^2 \right)^{0,5} - \frac{0,5R_{II_p}}{C_{II_p}\beta_{O_2,p}} \right] \bar{a}_{P,p} \bar{\rho} \cdot \frac{\tilde{x}_{mfKK,p}^P}{-v_{II_p,mfKK}} \quad (3.110)$$

Die Reaktionskinetik ist durch das Produkt der Geschwindigkeitskonstanten R_{II_p} und eines Potenzansatzes für den an der äußeren Partikeloberfläche vorliegenden Sauerstoffpartialdruck $\bar{p}_{O_2}^{A,p}$ erfasst [122]. Der Exponent des an der äußeren Partikeloberfläche vorliegenden Sauerstoffpartialdruckes betrage 0,5 [123]. Dementsprechend gilt für die Geschwindigkeit von Bruttoreaktion (R_{II_p}) der nachstehende Ausdruck.

$$\bar{m}_{Rea,II_p} = R_{II_p} \cdot \bar{p}_{O_2}^{A,p 0,5} \cdot \bar{a}_{P,p} \frac{\tilde{x}_{mfKK,p}^P}{-v_{II_p,mfKK}} \cdot \bar{\rho} \quad (3.111)$$

Die Geschwindigkeitskonstante ist eine auf die äußere Partikeloberfläche bezogene Größe [122], die die Umwandlung der mineralstofffreien Kokssubstanz beschreibt [123]. Dem Umstand, dass die Variable $\bar{a}_{P,p}$ die gesamte Oberfläche der Partikel einer Klasse beschreibt, insbesondere einschließlich der Mineralstoffe und der Asche, ist durch eine partielle Berücksichtigung der gesamten äußeren Partikeloberfläche für den Koksabbrand begegnet. Der Anteil dieser Reaktionsfläche an der äußeren Partikeloberfläche ist dem Anteil von mineralstofffreiem Koks im Partikel $\tilde{x}_{mfKK,p}^P$ gleichgesetzt, für den die nachstehende Näherung gilt (vgl. S. 54f). Hierbei bezeichnet $\tilde{x}_{C,p}$ den Massenanteil derjenigen Substanz, aus der mineralstofffreier Koks hervorgeht.

$$\tilde{x}_{mfKK,p}^P \approx \frac{\tilde{x}_{mfKK,p}}{\tilde{x}_{C,p} + \tilde{x}_{mfKK,p} + \tilde{x}_{A,p}} \quad (3.112)$$

$$\tilde{x}_{C,p} := (\tilde{x}_{mfKL,p} v_{0,p,mwfkL,p} + \tilde{x}_{mwfkL,p}) v_{I,p,mfKK,p} \quad (3.113)$$

Die Geschwindigkeitskonstante ist wie bei Smith [122] durch einen Arrheniusansatz modelliert, dessen Parameter kohlespezifische Größen sind (siehe Unterkapitel 4.5):

$$R_{II_p} = k_{0,II_p} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A,II_p}}{\bar{R} \cdot \bar{T}_{P,p}}\right) \quad (3.114)$$

Die Sauerstoffdiffusion durch die Partikelgrenzschicht ist einem empirischen Ansatz nach modelliert [121], woraus für die Geschwindigkeit von Bruttoreaktion (R_{II_p}) der nachstehende Ausdruck folgt (vgl. Gleichung (3.91)). Hierbei symbolisiert die Konstante C_{II_p} die Umrechnung des Sauerstoffumsatzes in den Koksumsatz.

$$\bar{m}_{Rea,II_p} = C_{II_p} \beta_{O_2,p} (\bar{p}_{O_2} - \bar{p}_{O_2}^{A,p}) \bar{a}_{P,p} \cdot \frac{\bar{x}_{mfKK,p}^P}{-v_{II_p,mfKK}} \cdot \bar{\rho} \quad (3.115)$$

$$C_{II_p} = \frac{v_{II_p,mfKK,p}}{v_{II_p,O_2}} \quad (3.116)$$

Die Modellierung des Stoffübertragungskoeffizienten der Sauerstoffdiffusion $\beta_{O_2,p}$ folgt dem von Field et al. [121] erläuterten Ansatz:

$$\beta_{O_2,p} = \frac{Sh_{G_S} \cdot D_{O_2}(\bar{T}_{G_S,p})}{D_{P,p}} \cdot \frac{M_{M,O_2}}{\bar{R} \cdot \bar{T}_{G_S,p}} \quad (3.117)$$

Die Sherwoodzahl Sh_{G_S} des Stoffübergangs in der Grenzschicht eines in einem Gas suspendierten Partikels stimmt einer Analogie zwischen Wärme- und Stoffübertragung nach näherungsweise mit der entsprechenden Nusseltzahl des Wärmeübergangs in der Grenzschicht überein [64]. Die Nusseltzahl des Wärmeübergangs in der Grenzschicht nimmt einen Wert von zwei an (siehe Unterkapitel 3.3.1). Der Diffusionskoeffizient ist durch den Diffusionskoeffizienten von Sauerstoff in einem Sauerstoff-Stickstoff-Gemisch angenähert (siehe Anhang C). Für die Temperatur in der Partikelgrenzschicht gilt Gleichung (3.52).

Für den Sauerstoffpartialdruck in der Gasphase gilt unter der Annahme eines idealen, inkompressiblen Verhaltens der Gasphase der folgende Ausdruck.

$$\bar{p}_{O_2} = p_{ref} \tilde{x}_{O_2} \left(M_{M,O_2} \sum_{b(P)} \left(\frac{\tilde{x}_b}{M_{M,b}} \right) \right)^{-1} \quad (3.118)$$

Partikelgröße

Die Größe von Partikeln kann sich während des Prozesses ändern. Die Berücksichtigung dessen sei auf den Teilprozess der Koksumwandlung beschränkt. Sie erfolgt durch den nachstehenden Ansatz, der eine Erweiterung des von Smith [122] erläuterten Ansatzes darstellt. Hierbei ist der Durchmesser $\bar{D}_{P,p}$ von Partikeln auf das Verhältnis des Massenverlustes zur ursprünglichen Masse der Partikel, den sogenannten Ausbrandwert $B_{CA,p}$, und auf den kohlespezifischen Ausbrandparameter $n_{Abd,p}$, dessen Festlegung in Unterkapitel 4.5 erläutert ist, zurückgeführt [124]:

$$\bar{D}_{P,p} = \bar{D}_{P,p}^0 (1 - \bar{B}_{CA,p})^{0,5 \cdot n_{Abd,p}} \quad (3.119)$$

Die Modellierung der ursprünglichen Partikeldurchmesser $\bar{D}_{P,p}^0$ ist in Unterkapitel 4.2 beschrieben.

Der exakten Berechnung des Ausbrandwertes $B_{CA,p}$ und der auf die Suspensionsmasse bezogenen äußeren Partikeloberfläche $\bar{a}_{P,p}$ steht die Eulersche Betrachtungsweise der Partikelphase entgegen. Bei dieser Betrachtungsweise kann nämlich die Rückmischung von Partikeln, die die Verteilung dieser Parameter beeinflusst, nicht explizit berechnet werden (vgl. [124]). Die Parameter sind daher entsprechend approximiert. Hierzu gleiche die auf die Suspensionsmasse bezogene, augenblickliche Partikelmasse der Summe des Massenanteils an mineralstofffreien Koks (\tilde{x}_{mfKK_p}), des Massenanteils derjenigen Partikelsubstanz, aus der mineralstofffreier Koks hervorgeht (\tilde{x}_{C_p}), und des Massenanteils an Asche (\tilde{x}_{A_p}). Die auf die Suspensionsmasse bezogene, ursprüngliche Partikelmasse sei unter der Randbedingung, dass Asche kein Produkt der Koksumwandlungsreaktion (R.II_p) ist, eine Funktion des Massenanteils an Asche und eines entsprechenden Umrechnungsfaktors C_{CA} . Den Ausführungen dieses Absatzes nach gelten für den Ausbrandwert und die auf die Suspensionsmasse bezogene äußere Partikeloberfläche die folgenden Gleichungen (vgl. [124]).

$$\bar{B}_{CA,p} \approx 1 - \frac{\tilde{x}_{mfKK_p} + \tilde{x}_{C_p} + \tilde{x}_{A_p}}{\tilde{x}_{A_p} C_{CA}} \quad (3.120)$$

$$\bar{a}_{P,p} \approx \frac{6}{\bar{D}_{P,p}^0 \bar{\rho}_{KL,p}^0} \cdot (1 - \bar{B}_{CA,p})^{n_{Abd,p} - 1} (\tilde{x}_{mfKK_p} + \tilde{x}_{C_p} + \tilde{x}_{A_p}) \quad (3.121)$$

$$C_{CA} := 1 + v_{I,p,mfKK_p} \cdot \frac{1 - x_{KL,p,A} - x_{KL,p,H_2O}}{x_{KL,p,A}} \quad (3.122)$$

Der Wert der Kohlendichte im Rohzustand $\bar{\rho}_{KL,p}^0$ ist in Tabelle 1.1 aufgeführt.

3.4 Resultierende Bilanzgleichungen

Den vorstehenden Erläuterungen nach ist der allgemeine Kohlenstaubverbrennungsprozess durch folgende Bilanzgleichungen beschrieben, die die Bilanz des Anteils der Strömungsbewegung an der Masse eines beliebigen Bestandteils, an der gesamten Masse, am gerichteten Impuls der Translation, am thermischen Anteil der Änderung der inneren Energie, an der Turbulenzenergie, an der Dissipation der Turbulenz und an der Strahlungsintensität darstellen.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{x}_b \tilde{u}_j - \left(\frac{\mu_G^{ig}}{Pr_G^{wb}} + \frac{\mu^{Tu}}{Pr_G^{Tu}} \right) \cdot \frac{\partial \tilde{x}_b}{\partial x_j} \right] = \sum_r [v_{r,b} \cdot \bar{m}_{Rea,r}] \quad (3.123)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_j] = 0 \quad (3.124)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \mu^{eff} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu^{eff} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \left(\bar{p}_G^{wb} + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k}_G + \frac{2}{3} \mu^{eff} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] + g_i \bar{\rho} \end{aligned} \quad (3.125)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \cdot \Delta \tilde{U}_{th} \cdot \tilde{u}_j - \left(\frac{\bar{p}}{\bar{\rho}_G} \frac{\mu_G^{Tu} \cdot \kappa_G}{Pr_G^{Tu}} + \frac{\mu_G^{ig} \cdot \kappa_G}{Pr_G^{wb}} \right) \cdot \frac{\partial \Delta \tilde{U}_{th}}{\partial x_j} \right] = \bar{S}_{Str} + \bar{S}_{chem} \quad (3.126)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{k}_G \tilde{u}_j - \frac{\mu^{eff}}{\sigma_k} \cdot \frac{\partial \tilde{k}_G}{\partial x_j} \right] = - \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\sigma}_{G,i,j}^{wb} \frac{\mu_G^{Tu}}{\bar{\rho}_G^2} \frac{\partial \bar{p}_G}{\partial x_i} \right] + \frac{\bar{p}}{\bar{\rho}_G} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} \right) \quad (3.127)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \varepsilon_G^{Tu} \tilde{u}_j - \frac{\mu^{eff}}{\sigma_\varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon_G^{Tu}}{\partial x_j} \right] \\ &= - \left(1,44 \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\sigma}_{G,i,j}^{wb} \frac{\mu_G^{Tu}}{\bar{\rho}_G^2} \frac{\partial \bar{p}_G}{\partial x_i} \right] + 1,44 \frac{\bar{p}}{\bar{\rho}_G} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + 1,92 \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} \right) \frac{\varepsilon_G^{Tu}}{\tilde{k}_G} \end{aligned} \quad (3.128)$$

$$\Gamma_j \langle x \rangle \cdot \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{I}_x = \bar{k}_{abs} \left(\frac{\sigma}{\pi} \bar{T}_G^4 - \bar{I}_x \right) \quad (3.129)$$

4 Modellierung anwendungsspezifischer Prozessmerkmale

Der allgemeine Kohlenstaubverbrennungsprozess ist seiner Erläuterung in Kapitel 3 nach durch ein unterbestimmtes Gleichungssystem beschrieben, zu dessen Schließung verschiedene anwendungsspezifische Prozessmerkmale modelliert sind, wie in den folgenden Unterkapiteln dargelegt ist.

4.1 Simulationsraum

Der Simulationsraum umfasse aufgrund der verfügbaren Rechenkapazität nur ein Teilgebiet der Feuerräume und des Strahlungsraumes, wie nachfolgend erläutert ist und wie die nebenstehende Abbildung verdeutlicht. Die Brenner sind an acht, prinzipiell unterschiedlichen Positionen äquidistant verbaut, weswegen eine seitliche Schnittfläche des Simulationsraums parallel zu den Seitenwänden und mittig durch den Dampferzeuger verläuft. Der Zustand des Prozesses an diesen Schnittflächen sei spiegelsymmetrisch, da der Drall von nebeneinander installierten Brennern gegensätzlich orientiert ist. Dementsprechend trete Materie über diese Schnittflächen weder ein noch aus und Wärmestrahlung werde an den Flächen entsprechend „reflektiert“ (vgl. [125]). Eine weitere Schnittfläche verlaufe parallel zur Vorderwand und mittig durch den Strahlungsraum. Der Zustand des Prozesses an dieser Schnittfläche sei ebenfalls spiegelsymmetrisch, da die Strömung in diesem Bereich vorwiegend vertikal nach oben gerichtet ist. Eine Simulation des beide Feuerräume und den Strahlungsraum vollständig umfassenden Gebietes mit der in Tabelle 6.3 aufgeführten Güte ist mit der zur Verfügung stehenden Rechenkapazität nicht möglich.

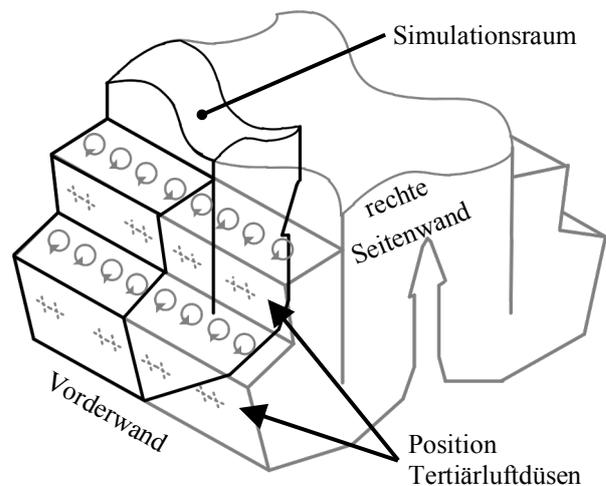


Abbildung 4-1: Design Simulationsraum

Die Kohlenstaub-Luft-, Sekundärluft- und Kühlluftströme treten über Einlassflächen ein, deren Lage die gestrichelten Linien in der nebenstehenden Abbildung zeigen (vgl. Abbildung 2-5). Die Einlassflächen für die Tertiärluftströme sind deckungsgleich mit den entsprechenden Öffnungen in der Vorderwand. Die Austrittsfläche des Simulationsraumes verlaufe senkrecht zu den Strahlungsraumwänden und liege unmittelbar vor den Konvektivheizflächen, deren Lage in Abbildung 2-2 dargestellt ist.

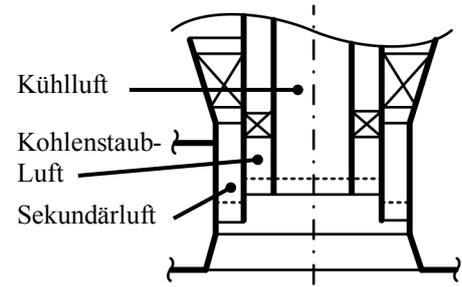


Abbildung 4-2: Einlassflächen an den Brennern

Die Wandtemperatur nehme konstante, betriebsübliche Werte an: an den Brennerwänden 250 °C, an den Feuerraumwänden 1200 °C und an den Strahlungsraumwänden 400 °C.

4.2 Massenstrom und Zustand der eintretenden Ströme

Massenstrom

Jeder Kohle- und Luftgesamtmassenstrom geht mittels einer Verbrennungsrechnung aus den entsprechenden, in Kapitel 1 und Unterkapitel 2.2 genannten Daten hervor. Ihre Verläufe über dem Anteil an Feuerungswärmeleistung durch Rheinische Braunkohle sind nachstehend dargestellt. Eine Förderung dieser Massenströme mit der installierten Anlagentechnik sei möglich.

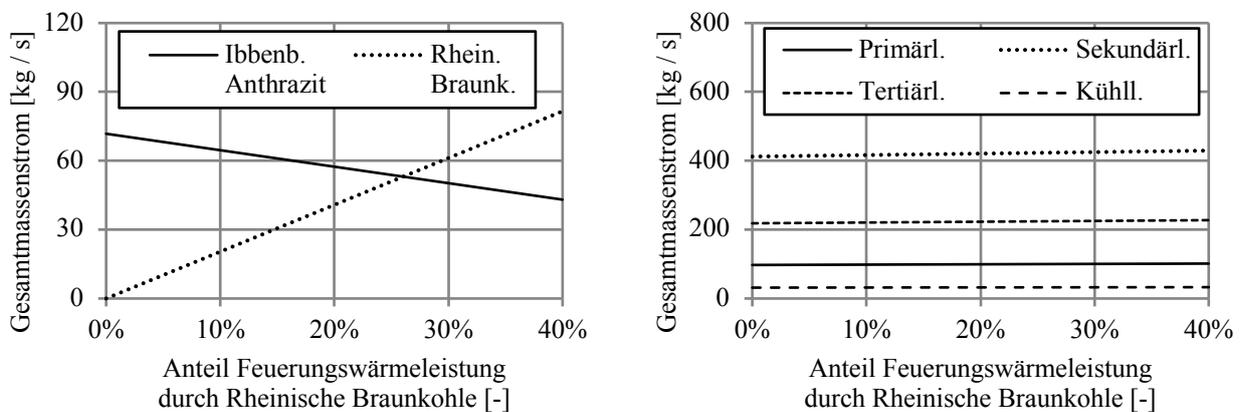


Abbildung 4-3: Gesamtmassenstrom jedes Kohle- und Luftstromes

Jeder Gesamtmassenstrom ströme gleichmäßig über die jeweiligen Eintrittsöffnungen verteilt in die Mahltrocknungsanlagen und die Feuerräume ein. In den Brennern verdrallte Ströme nehmen vereinfachend den Anstellwinkel der Schaufeln an.

Zustand

Die gesamte Verbrennungsluft werde aus einer Umgebung mit einer Temperatur von 15 °C und einer relativen Feuchte von 20% angesaugt. Jegliche Leckage von Luft und Rauchgas im Luftvorwärmer sei vernachlässigbar gering. Die Temperatur jedes Luftstroms hinter dem Luftvorwärmer nehme unabhängig vom Anteil an Rheinischer Braunkohle einen betriebsüblichen Wert von 385 °C an (siehe Unterkapitel 2.2). Die Strömung der Luft zwischen den Luftvorwärmern und den entsprechenden Eintritten sowie die Strömung jedes Kohlenstaub-Luft-Gemisches erfolge adiabatisch.

Die Festlegung des Zustandes des Kohlenstaub-Luft-Stromes am Feuerraumeintritt bedarf einer Abstraktion des Mahltrocknungsprozesses, der für Mischungen der betrachteten Kohlen in einer Walzenschüsselmühle unerforscht ist. Zur Berücksichtigung der Trocknung dient eine vereinfachte Form des in Unterkapitel 3.3.4 erläuterten Trocknungsmodells. Die Vereinfachungen bestehen darin, dass die Temperatur der Partikel und die Temperatur der sie umgebenden Gasphase stets übereinstimme, weswegen keine Energiebilanz zusätzlich zur Stoffbilanz zu lösen ist, und dass zum anderen jeder Kohlenstaub-Luft-Strom im stofflichen Gleichgewichtszustand aus der Walzenschüsselmühle austrete. Die Mahltrocknungsanlage gebe erfahrungsgemäß Wärme in Höhe von 5% der thermischen Energie der eintretenden Primärluft an die Umgebung ab. Der Zustand der die Mahltrocknungsanlagen verlassenden Kohlenstaub-Luft-Ströme ist nachstehend veranschaulicht.

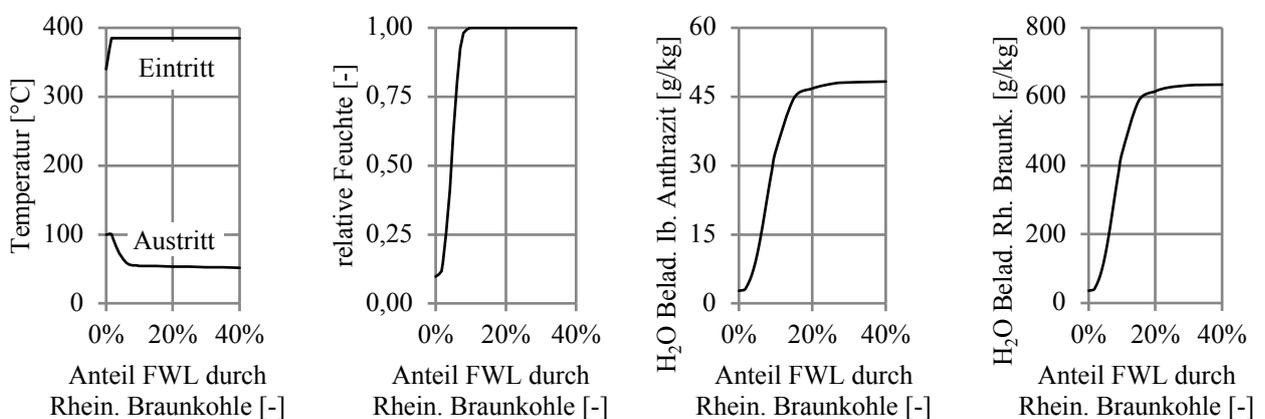


Abbildung 4-4: Zustand der die Mahltrocknungsanlagen verlassenden Kohlenstaub-Luft-Ströme

Bis zu einem Feuerungswärmeanteil durch Rheinische Braunkohle von etwa 1,5% kann die Temperatur am Mahltrocknungsanlagenaustritt auf einen Wert von 100 °C geregelt werden (vgl. Unterkapitel 2.2). Anschließend saugen die Primärlüfter ausschließlich Warmluft an. Bis zu einem Feuerungswärmeanteil durch Rheinische Braunkohle von etwa 10% sinkt, bedingt durch die Zunahme des verdunstenden Wassermassenstroms, die Austrittstemperatur auf etwa 55 °C. Gleichzeitig erhöht sich die relative Feuchte am Austritt, bis der Kohlenstaub-Luft-Strom an Feuchtigkeit gesättigt ist. Bedingt durch die sich ändernden Bedingungen am Austritt steigt der Wassergehalt der Kohle markant an. Ab einem Feuerungswärmeanteil durch Rheinische Braunkohle von etwa 15% ändert sich der Zustand am Austritt kaum, da über die Sättigung hinaus keine Trocknung stattfindet.

Die betriebsübliche Staubfeinheit am Austritt der Mahltrocknungsanlagen ist nachstehend aufgeführt. Sie ist durch einen exponentiellen Verlauf des Rückstandes R_D nach Rosin et al. [126] beschrieben, wobei der Rückstand dem Massenanteil derjenigen Partikel gleicht, die größer als der zum Rückstand zugehörige Durchmesser sind.

$$R_D = \exp \left[- \left(\frac{D_P}{54,124 \cdot 10^{-6}} \right)^{1,7190} \right] \quad (4.1)$$

Über die Feinheit der Kohlenstäube bei Einsatz einer Mischung von Ibbenbürener Anthrazitkohle und Rheinischer Braunkohle liegen keine Erkenntnisse vor. Daher ist in Unterkapitel 6.1 der Einfluss der Staubfeinheiten auf den Kohlenstaubverbrennungsprozess mittels einer entsprechenden Sensitivitätsanalyse untersucht, bei der der Durchmesser um jeweils 15% vom entsprechenden Durchmesser der betriebsüblichen Staubfeinheit abweicht. Hierbei ist jede Rückstandsverteilung durch sechs Partikelklassen abstrahiert. Die folgende Abbildung zeigt die verschiedenen Rückstandskurven.

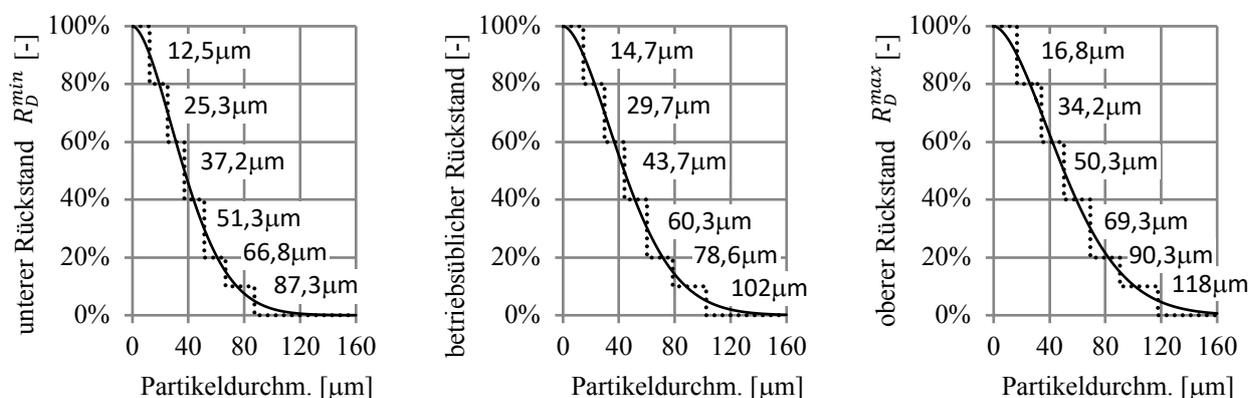


Abbildung 4-5: Variation und Abstraktion der Kohlenstaubrückstände

4.3 Stoffverhalten

Die Modellierung des Stoffverhaltens nach Unterkapitel 3.3.1 beinhaltet die Berechnung von Stoffwerten mittels anwendungsspezifischer Zusammenhänge, wie im Folgenden erläutert ist.

Die Prandtlzahl Pr_G^{wb} ist mit einem konstanten Wert von 0,70 und der Isentropenexponent κ_G mit 1,29 bedacht. Diese Festlegungen basieren auf den folgenden Diagrammen, die den temperaturabhängigen Verlauf der genannten Stoffwerte für trockene Luft und ein Rauchgas zeigen. Das Rauchgas entsteht bei vollständiger Verbrennung von Ibbenbürener Anthrazitkohle mit dem betriebsüblichen Gesamtluftverhältnis von 1,08. Eine Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle mit einem Feuerungswärmeanteil von bis zu 40% beeinflusst alle nachfolgend dargestellten Verläufe um weniger als 3%.

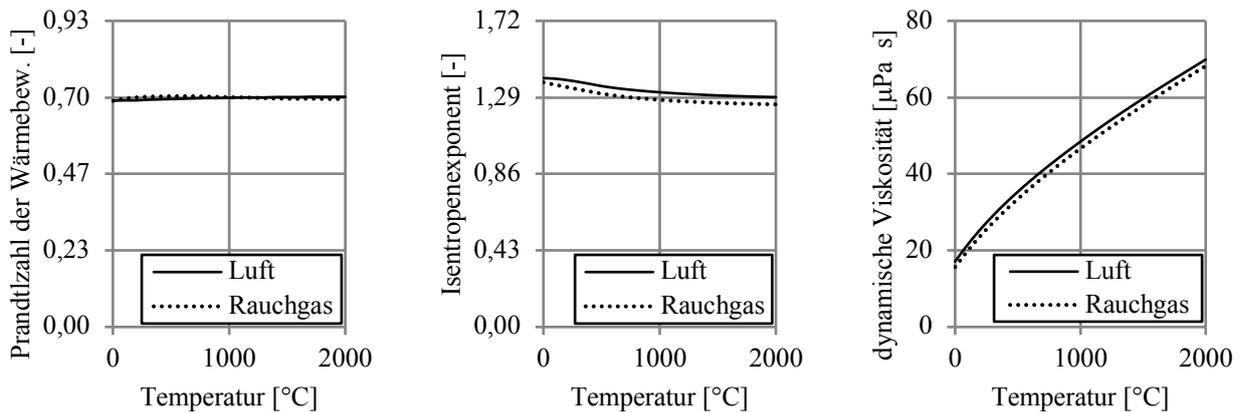


Abbildung 4-6: Prandtlzahl, Isentropenexponent und dynamische Viskosität

Die Berechnungsfunktion für die dynamische Viskosität der Gasphase μ_G^{ig} , nachfolgend aufgeführt, ist aus dem entsprechenden Mittelwert der in Abbildung 4-6 gezeigten Verläufe regressiv bestimmt.

$$\mu_G^{ig} = \frac{29,94}{10^6} \left(\frac{T}{2273,15} \right)^3 - \frac{74,51}{10^6} \left(\frac{T}{2273,15} \right)^2 + \frac{109,2}{10^6} \left(\frac{T}{2273,15} \right) + \frac{4,632}{10^6} \quad (4.2)$$

Der Massenanteil und die mittlere Verweildauer der Moleküle im Bereich der Fine Structures erfordern gemäß der Gleichungen (3.101) und (3.107) die Berechnung der kinematischen Viskosität der Gasphase ν_G . Dieser Stoffwert ist durch einen von Schnell [127] beschriebenen Ansatz erfasst, bei dem die Abhängigkeit des Stoffwertes von der Zusammensetzung der Gasphase vernachlässigt ist:

$$\nu_G = 1,178 \cdot 10^{-4} \cdot \left(\frac{T}{1000} \right)^{1,65} \quad (4.3)$$

Die zur Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten in der Partikelgrenzschicht nach Gleichung (3.51) nötige Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{Gs,p}$ ist durch eine auf Ayling et al. [128] zurückgehende Berechnungsvorschrift beschrieben:

$$\lambda_{Gs,p} = 2,43 \cdot 10^{-2} \left(\frac{T}{273,15} \right)^{0,82} \quad (4.4)$$

4.4 Strahlungsverhalten

Die Berechnung des Strahlungswärmetransports nach Gleichung (3.83) bedarf einer Modellierung des Absorptionskoeffizienten beider Phasen, worauf in den folgenden Unterkapiteln eingegangen ist.

Absorptionskoeffizient der Gasphase

Der Absorptionskoeffizient der Gasphase ist auf den in einem halbkugelförmigen Raum exakt gültigen Emissionsgrad der Gasphase zurückgeführt (vgl. [129]). Der in einer Halbkugel exakt gültige Emissionsgrad ist als Verhältnis der von der Halbkugel auf ein infinitesimal kleines Flächenelement im Kugelmittelpunkt eingestrahlten Strahlungsdichte und der Strahlungsdichte eines gleichtemperierten schwarzen Körpers definiert [130]. Der Radius der Halbkugel entspricht der gleichwertigen Schichtdicke δ . Zwischen dem Absorptionskoeffizienten der Gasphase $k_{abs,G}$ und ihrem Emissionsgrad ε_G besteht der folgende Zusammenhang [130].

$$k_{abs,G} = -\frac{1}{\delta} \cdot \ln(1 - \varepsilon_G) \quad (4.5)$$

Die gleichwertige Schichtdicke gleicht näherungsweise dem 3,6-fachen Verhältnis aus dem Volumen und der Oberfläche des betrachteten Raumes (vgl. [129]). Dementsprechend nimmt die gleichwertige Schichtdicke für den Raum, bestehend aus den beiden Feuerräumen und dem Strahlungsraum des Kraftwerks Ibbenbüren, einen Wert von etwa 11,8 m an.

Der Emissionsgrad der Gasphase hängt vom Emissionsgrad jedes Bestandteils ab. Dieser Zusammenhang ist vereinfachend berücksichtigt, indem der Emissionsgrad der Gasphase dem Emissionsgrad eines Gemisches aus Wasserdampf, Kohlenstoffdioxid und einer für den Emissionsgrad

vernachlässigbaren Komponente gleiche. Wasserdampf und Kohlenstoffdioxid dominieren nämlich für Kohlenstaubverbrennungsprozesse den Emissionsgrad der Gasphase im Bereich der Wärmestrahlung (vgl. [131]). Die Berechnung des Emissionsgrads erfolge nach dem Ansatz von Leckner [132]. Diesem Ansatz zufolge setze sich der Emissionsgrad additiv aus den Emissionsgraden beider Komponenten abzüglich eines Anteils $\Delta\varepsilon$ zusammen, durch den der Überlappung beider Emissionsbanden Rechnung getragen wird:

$$\varepsilon_G = \varepsilon_{H_2O} + \varepsilon_{CO_2} - \Delta\varepsilon \quad (4.6)$$

Die Berechnungsvorschriften für die Emissionsgrade und für die Bandenüberlappung sind in Anhang E aufgeführt. Die Verläufe dieser Größen für den vorliegenden Anwendungsfall mit einer gleichwertigen Schichtdicke von etwa 11,8 m sind nachfolgend dargestellt.

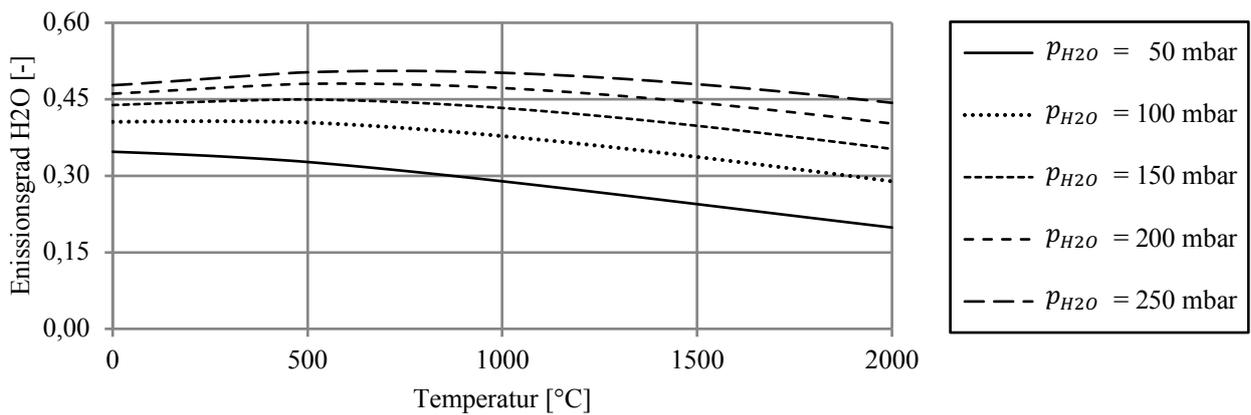


Abbildung 4-7: Emissionsgrad Wasserdampf ($\delta = 11,8 \text{ m}$)

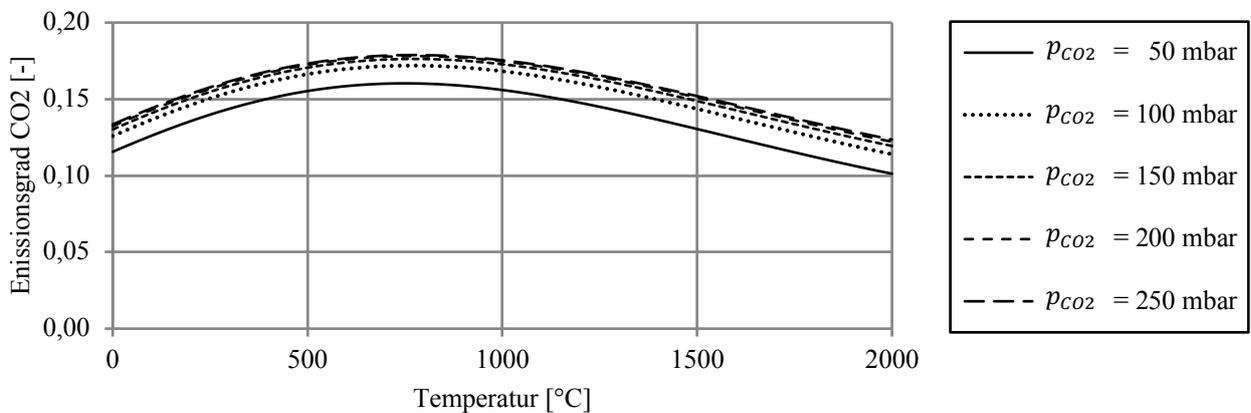
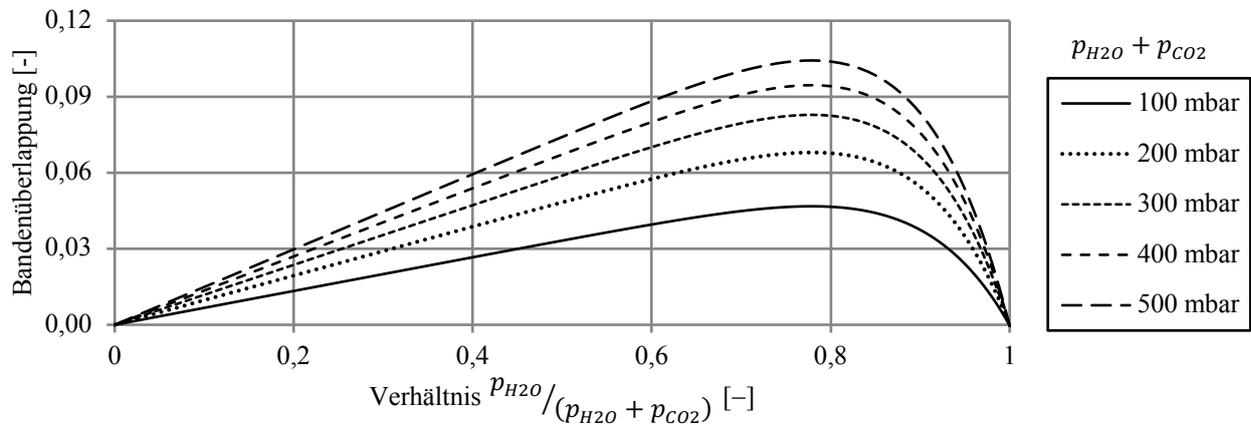


Abbildung 4-8: Emissionsgrad Kohlenstoffdioxid ($\delta = 11,8 \text{ m}$)

Abbildung 4-9: Bandenüberlappung ($\delta = 11,8 \text{ m}$)

Absorptionskoeffizient der Partikelphase

Der Absorptionskoeffizient der Partikelphase $k_{abs,P}$ hängt wie folgt von ihrem Emissionsgrad ε_P ab:

$$k_{abs,P} = -\frac{1}{\delta} \cdot \ln(1 - \varepsilon_P) \quad (4.7)$$

Der Emissionsgrad der Partikelphase werde mithilfe des Strahlungsmodells für höhere Staubbeladungen gemäß VDI Wärmeatlas [133] berechnet:

$$\varepsilon_P = 2 \left(\sqrt{1 + \frac{2Q_{rstr}}{Q_{abs}}} \cdot \frac{1 + \exp(-Q_{abs} \bar{a}_P^{mit} \bar{\rho} \delta \sqrt{1 + \frac{2Q_{rstr}}{Q_{abs}}})}{1 - \exp(-Q_{abs} \bar{a}_P^{mit} \bar{\rho} \delta \sqrt{1 + \frac{2Q_{rstr}}{Q_{abs}}})} + 1 \right)^{-1} \quad (4.8)$$

Die voranstehende Berechnungsgleichung enthält unter anderem die relativen Wirkungsquerschnitte für Absorption Q_{abs} und Rückwärtsstreuung Q_{rstr} , die die entsprechenden optischen Eigenschaften der Partikel beschreiben. Beide Größen hängen näherungsweise nicht von der Kohle sondern vom massengemittelten Partikeldurchmesser \bar{D}_P^{mit} ab, wie die nachstehenden Berechnungsgleichungen und Abbildungen verdeutlichen.

$$Q_{abs} = -0,24 + 0,215 \cdot \ln(\bar{D}_P^{mit} \cdot 10^6) \quad (4.9)$$

$$Q_{rstr} = \left(1 - \exp\left(-80 \left(\frac{\bar{D}_P^{mit}}{10^{-4}}\right)\right) \right) \cdot \left(0,851 \left(\frac{\bar{D}_P^{mit}}{10^{-4}}\right)^4 - 2,462 \left(\frac{\bar{D}_P^{mit}}{10^{-4}}\right)^3 + 2,672 \left(\frac{\bar{D}_P^{mit}}{10^{-4}}\right)^2 - 1,334 \left(\frac{\bar{D}_P^{mit}}{10^{-4}}\right) + 0,307 \right) \quad (4.10)$$

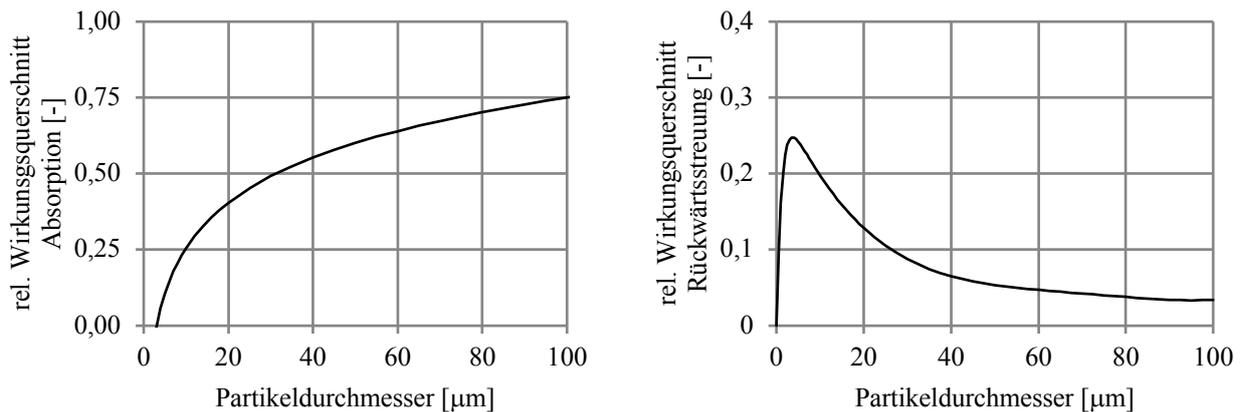


Abbildung 4-10: relative Wirkungsquerschnitte für Absorption und Rückwärtsstreuung [133]

4.5 Umwandlungsverhalten

Zur vollständigen Abstraktion des Umwandlungsverhaltens bedarf es einer Modellierung der Zersetzung von Kohle in Koks, Teerstoffe und die Summe aller Primärgase, der Zusammensetzung des stickstoff- und schwefelfreien Primärgasanteils und der Umwandlungsparameter von Koks. Die Modellierung ist dieser Unterscheidung nach in den folgenden Unterkapiteln erläutert.

Zersetzung von Kohle in Koks, Teerstoffe und die Summe aller Primärgase

Unter den Bedingungen einer Staubfeuerung entweichen mehr Flüchtige Bestandteile als unter den Bedingungen nach DIN 51720 [6] [24]. Zur Bestimmung der Aufteilung von Kohle in Koks, Teerstoffe und die Summe aller Primärgase dient das ursprünglich von Grant et al. [134] entwickelte und von Fletcher et al. [105] und Genetti [135] erweiterte Chemical Percolation Devolatilization Modell. Mithilfe dessen können verschiedene kohleindifferente Vorgänge der Primärpyrolyse für einen vorgegebenen Temperaturverlauf simuliert werden. Voraussetzung hierfür ist die Kenntnis einiger, die chemische Struktur der entsprechenden Kohle charakterisierender Parameter. Diese sind gemäß dem

Ansatz von Genetti [135] aus der Kohlezusammensetzung nach Tabelle 1.1 bestimmt. Der berechnete Massenanteil der Summe aller Primärgase und der Teerstoffe ist für verschiedene Endtemperaturen bei einer für Kohlenstaubverbrennungsprozesse üblichen Aufheizgeschwindigkeit von 10^4 K/s nachstehend veranschaulicht. Eine Variation der Aufheizgeschwindigkeit im Bereich zwischen 10^3 und 10^5 K/s übt keinen erkennbaren Einfluss auf die gezeigten Verläufe aus.

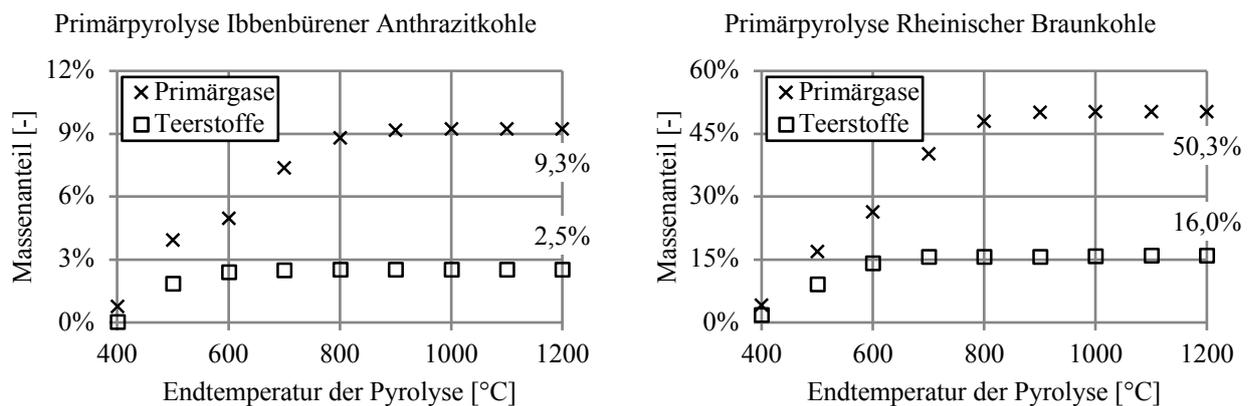


Abbildung 4-11: Massenanteil von Primärgasen und Teerstoffen im Produkt der Primärpyrolyse

Vor dem Hintergrund einer vergleichsweise hohen Temperatur in den Feuerräumen des Kraftwerks Ibbenbüren (vgl. Unterkapitel 2.2) nehme der Massenanteil der Primärgase und Teerstoffe den maximalen, in Abbildung 4-11 explizit angegebenen Wert an.

Zusammensetzung des stickstoff- und schwefelfreien Primärgasanteils

Der stickstoff- und schwefelfreie Primärgasanteil bestehe gemäß Bruttoreaktion (R.I_p) aus Kohlenstoffmonoxid, Kohlenstoffdioxid, Wasserstoff, Wasser und Methan. Der darin enthaltene Anteil an Kohlenstoff, Wasserstoff und Sauerstoff ist dem vorstehenden Unterkapitel und Unterkapitel 3.3.4 nach vorgegeben, sodass die entsprechenden Elementenbilanzen drei Randbedingungen für die Verteilung der fünf Bestandteile bilden. Genauere Kenntnis über die Primärgaszusammensetzung besteht nicht. Deswegen ist in Unterkapitel 6.1 auch der Einfluss der Primärgaszusammensetzung auf den Kohlenstaubverbrennungsprozess mittels einer entsprechenden Variation analysiert. Die Grenzen der Variation ergeben sich aus der Randbedingung, dass jeder Massenanteil einen Wert von null nicht unterschreiten darf. Die folgenden Tabellen stellen die Variationsgrenzen dar.

Tabelle 4.1: niederkalorische Grenze der stickstoff- und schwefelfreien Primärgase

Ursprungskohle	H_u^{min} in MJ/kg	x_{CO}	x_{CO_2}	x_{H_2}	x_{H_2O}	x_{CH_4}
Ibb. Anthrazitk.	52,877	0,00%	0,00%	14,38%	14,39%	71,23%
Rhein. Braunk.	18,880	59,04%	15,14%	0,00%	0,00%	25,82%

Tabelle 4.2: hochkalorische Grenze der stickstoff- und schwefelfreien Primärgase

Ursprungskohle	H_u^{max} in MJ/kg	x_{CO}	x_{CO_2}	x_{H_2}	x_{H_2O}	x_{CH_4}
Ibb. Anthrazitk.	54,524	22,37%	0,00%	19,21%	0,00%	58,42%
Rhein. Braunk.	19,731	78,31%	0,00%	1,39%	0,00%	20,30%

Umwandlungsparameter von Koks

Die Kinetik der Koksumwandlung hängt nach Gleichung (3.114) vom Frequenzfaktor $k_{0,II,p}$ und der Aktivierungsenergie $E_{A,II,p}$ ab, deren Werte die folgende Tabelle zeigt. Für Koks aus Rheinischer Braunkohle gleichen die Geschwindigkeitsparameter vereinfachend den Parametern von Koks aus Braunkohle aus Yallourn.

Tabelle 4.3: Abbrandparameter verschiedener Koke

Ursprungskohle	$k_{0,II,p}$ in $kg/(m^2 \cdot Pa^{0,5} \cdot s)$	$E_{A,II,p}$ in J/mol	Quelle
Ibbenbürener Anthrazitkohle	0,040	66000	[136]
Braunkohle aus Yallourn	0,292	67781	[108]

Die Änderung der Partikelgröße ist den Gleichungen (3.119) und (3.121) nach mithilfe des Ausbrandparameters $n_{Abd,p}$ beschrieben. Dieser nehme sowohl für den Koks aus Ibbenbürener Anthrazitkohle als auch für den Koks aus Rheinischer Braunkohle einen Wert von 0,6667 an. Dieser Festlegung liegt die Überlegung zugrunde, dass die Koksumwandlung aufgrund der hohen Temperatur in der Brennkammer überwiegend kinetisch dominiert ist und dass sie deswegen ausschließlich an der Oberfläche erfolgt.

5 Aufbereitung und Berechnung des Gleichungssystems

Die den Prozess beschreibenden Bilanzgleichungen (3.35) bis (3.41) bilden ein in dieser Form nicht lösbares Gleichungssystem. Dessen erforderliche Aufbereitung erfolgt bei den materiespezifischen Bilanzgleichungen nach dem Finite Volumen Verfahren und bei der Bilanzgleichung für die gerichtete Strahlungsintensität nach dem Discrete Ordinates Verfahren von Chandrasekhar [137]. Beide Verfahren beinhalten

- die Unterteilung des Simulationsraumes in nicht überlagerte Kontrollvolumina,
- die Umformung der für jedes Kontrollvolumen aufgestellten Bilanzgleichungen und
- die Approximation von Größen an den Rändern der Kontrollvolumina.

Diese Aufbereitung führt zu einem linearen und damit lösbareren Gleichungssystem, mithilfe dessen eine Näherung des Prozesszustandes an diskreten Stellen berechnet werden kann. Die Aufbereitung und Berechnung des Gleichungssystems ist in den folgenden Unterkapiteln erläutert.

5.1 Unterteilung des Simulationsraumes in nicht überlagerte Kontrollvolumina

Die Unterteilung des Simulationsraumes in nicht überlagerte Kontrollvolumina erfolgt je nach Teilgebiet auf verschiedene Weise, um den Berechnungsaufwand zu reduzieren und eine ausreichende Genauigkeit des Ergebnisses zu erreichen. Wählbare Eigenschaften der Kontrollvolumina sind ihre Form, ihre Größe und ihre Orientierung. Die Übergabe von Größen an den Teilgebietsrändern wurde unter anderem von Schneider [138] erläutert. Verschieden unterteilte Teilgebiete sind die Brenner (A), die Brennernahfelder (B), der übrige Feuerraum (C), ein unterer Strahlungsraum (D) und ein oberer Strahlungsraum (E), wie Abbildung 5-1 veranschaulicht.

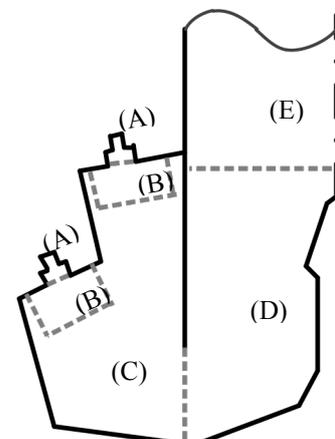


Abbildung 5-1: Unterteilung des Simulationsraumes

Das Teilgebiet der Brenner (A) ist mithilfe von Zylinderkoordinaten unterteilt, deren Achse der Brennerachse entspricht. Der Winkel, die axiale und die radiale Dimension der Kontrollvolumina betragen 8° , 2 cm und ca. $1,2 \text{ cm}$. Die übrigen Teilgebiete sind mithilfe von kartesischen Koordinaten unterteilt. Die Kontrollvolumina im Teilgebiet der Brennernahfelder (B) und des übrigen Feuerraums (C) sind Würfel mit einer Kantenlänge von 5 cm bzw. 10 cm . Das Teilgebiet des Strahlungsraumes ist in Quader mit einem quadratischen Querschnitt von 400 cm^2 unterteilt. Ihre Ausdehnung in Hauptströmungsrichtung beträgt im unteren Teilgebiet (D) 10 cm und im oberen Teilgebiet (E) 30 cm .

5.2 Umformung der für jedes Kontrollvolumen aufgestellten Bilanzgleichungen

Die Umformung der für jedes Kontrollvolumen aufgestellten Bilanzgleichungen entspricht einer Integration aller Bilanzgleichungen über das jeweilige Kontrollvolumen, die Umformung verschiedener Volumenintegrale mithilfe des Gaußschen Integralsatzes in entsprechende Flächenintegrale und die Umformung aller Integrale mittels numerischer Integration in entsprechende Summen. Durch die Anwendung der numerischen Integration gehen die kontinuierlich definierten Größen in diskret verteilte, flächen- bzw. volumenspezifische Mittelwerte über. Zu ihrer Unterscheidung sind Mittelwerte im Mittelpunkt eines Kontrollvolumens durch MP , Mittelwerte am Rand eines Kontrollvolumens in positiver Richtung der Koordinaten i mit $+i$ und Mittelwerte am Rand eines Kontrollvolumens in negativer Richtung der Koordinaten i mit $-i$ hochgestellt indiziert. Der Bezug von Mittelwerten auf ein bestimmtes Kontrollvolumen ist der Übersichtlichkeit wegen nicht gekennzeichnet. Die umgeformten materieszpezifischen Bilanzgleichungen sind durch die für eine Bilanzgröße ϕ gültige Bilanzgleichung (5.1) zum Ausdruck gebracht, während Bilanzgleichung (5.2) die umgeformte Bilanzgleichung für die gerichtete Strahlungsintensität darstellt. Hierbei bezeichnen A_{KV} und V_{KV} die Randflächen bzw. das Volumen des jeweiligen Kontrollvolumens. [139] [140]

$$\begin{aligned} & \sum_i \left[(\bar{\rho} \tilde{u}_j)^{+i} \phi^{+i} A_{KV}^{+i} + \left(\frac{\mu^{eff}}{\sigma_\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)^{+i} A_{KV}^{+i} \right] \\ & - \sum_i \left[(\bar{\rho} \tilde{u}_j)^{-i} \phi^{-i} A_{KV}^{-i} + \left(\frac{\mu^{eff}}{\sigma_\phi} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)^{-i} A_{KV}^{-i} \right] = S_\phi^{MP} \cdot V_{KV} \end{aligned} \quad (5.1)$$

$$\sum_i [\Gamma_i \langle m \rangle (\bar{I}_m^{+i} A_{KV}^{+i} - \bar{I}_m^{-i} A_{KV}^{-i})] = \bar{k}_{abs}^{MP} \cdot \left(\frac{\sigma}{\pi} \tilde{T}_G^{MP4} - \bar{I}_m^{MP} \right) \cdot V_{KV} \quad (5.2)$$

Die spezifischen Größen von Bilanzgleichung (5.1) zeigt die nachstehende Tabelle. Hierbei ersetzt die effektive Prandtlzahl Pr_G^{eff} die Prandtlzahl der Wärmebewegung Pr_G^{Wb} und die Prandtlzahl der Turbulenz Pr_G^{Tu} , da beide Kennzahlen mit dem gleichen Wert bedacht sind.

Tabelle 5.1: Größen der Bilanzgleichung (5.1)

ϕ	σ_ϕ	S_ϕ
\tilde{x}_b	Pr_G^{eff}	$\sum_r [v_{r,b} \cdot \bar{m}_{Rea,r}]$
1	∞	0
\tilde{u}_i	1	$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu^{eff} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \left(\frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k}_G + \bar{p}_G^{Wb} + \frac{2}{3} \mu^{eff} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] + g_i \bar{\rho}$
$\Delta \tilde{U}_{th}$	$\frac{Pr_G^{eff}}{\kappa_G}$	$\sum_m \left[\bar{k}_{abs} \bar{I}_m \cdot \frac{4\pi}{24} \right] - 4 \bar{k}_{abs} \sigma \bar{T}_G^4 - \sum_r [\Delta U_{Rea,r} \cdot \bar{m}_{Rea,r}]$
\tilde{k}_G	σ_k	$-\left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb} \frac{\mu_G^{Tu}}{\bar{\rho}_G^2} \frac{\partial \bar{\rho}_G}{\partial x_i} \right] + \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu}$
ε_G^{Tu}	σ_ε	$-1,44 \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb} \frac{\mu_G^{Tu}}{\bar{\rho}_G^2} \frac{\partial \bar{\rho}_G}{\partial x_i} \right] + \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \frac{\varepsilon_G^{Tu}}{\tilde{k}_G} - 1,92 \bar{\rho}_G \frac{\varepsilon_G^{Tu^2}}{\tilde{k}_G}$

Die obere Grenze der Trocknungsgeschwindigkeit enthält nach Gleichung (3.94) den Massenstrom an wasserfreier Kohlesubstanz über eine infinitesimale Weglänge. Dessen Mittelwert im Mittelpunkt eines Kontrollvolumens ist dem vektoriellen Mittelwert der in das Kontrollvolumen eintretenden Massenströme an wasserfreier Kohlesubstanz gleichgesetzt.

$$\left(\frac{\tilde{x}_{wfkL,p} \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} \right)^{MP} \cdot V_{KV} \approx \sqrt{\sum_i \left(\left(\tilde{x}_{wfkL,p} \bar{\rho} \tilde{u}_j \right)_{in\ KV\ eintretend}^i \right)^2} \cdot A_{KV}^i \quad (5.3)$$

Negative Quellterme S_ϕ müssen in das Produkt der entsprechenden Bilanzgröße ϕ und einer entsprechenden Restgröße überführt werden, damit das numerische Lösungsverfahren konvergiert [141].

Eine Vereinfachung beim Discrete Ordinates Verfahren ist die Abstraktion der kontinuierlich über den Raumwinkel verteilten Strahlungsintensität durch eine diskrete Anzahl an Strahlungsintensitäten, die über den entsprechenden Raumwinkel konstant seien. Im vorliegenden Anwendungsfall seien 24 gleich große und gleichmäßig verteilte Raumwinkel unterschieden, die durch den Index m unterschieden sind, wie beispielsweise aus Bilanzgleichung (5.2) hervorgeht. Die Unterteilung des Raumwinkels ist durch die nebenstehende Abbildung veranschaulicht.

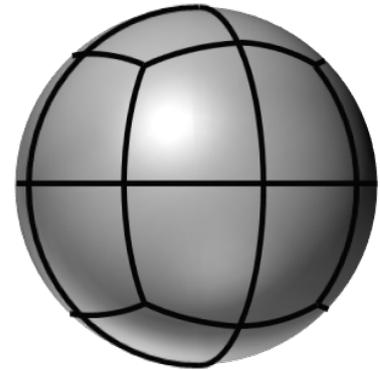


Abbildung 5-2: Unterteilung des Raumwinkels

5.3 Approximation von Größen an den Rändern der Kontrollvolumina

Die an den Rändern der Kontrollvolumina zu approximierenden Größen umfassen die Bilanzgröße ϕ , den konvektiven Fluss $\bar{\rho}\bar{u}_j$, den Diffusionsstrom $\mu^{eff}/\sigma_\phi \cdot \partial\phi/\partial x_j$ und die gerichtete Strahlungsintensität \bar{I}_m . Die angewendeten Approximationsverfahren sind nachfolgend kurz zusammengefasst.

Die Approximation der Bilanzgröße ϕ erfolge nach dem Monotonized Linear Upwind Verfahren von Noll [142]. Hierbei hängt der Wert der Bilanzgröße auf einem Kontrollvolumenrand sowohl vom linearen Gradienten der Bilanzgröße über diesen Rand als auch vom linearen Gradienten der Bilanzgröße über den nächsten, stromauf liegenden Rand ab. Haben beide Gradienten das gleiche Vorzeichen, gehen beide Gradienten in die Bestimmung der Bilanzgröße ein (Genauigkeit zweiter Ordnung). Im Fall eines gegensätzlichen Vorzeichens nimmt die Bilanzgröße auf einem Kontrollvolumenrand den Wert der Bilanzgröße im Mittelpunkt des entsprechenden stromauf liegenden Kontrollvolumens an (Genauigkeit erster Ordnung) an. Die nachstehende Abbildung veranschaulicht das Verfahren.

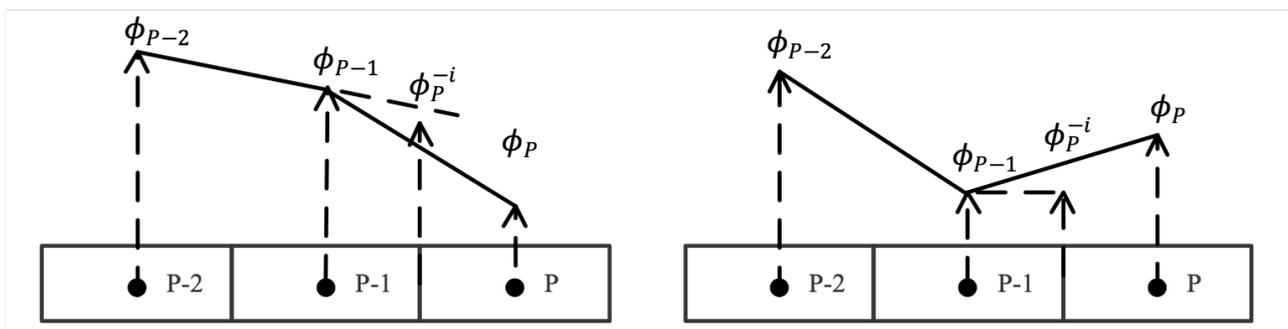


Abbildung 5-3: Monotonized Linear Upwind Verfahren [142] (Strömung von links nach rechts)

Der konvektive Fluss $\bar{\rho}\tilde{u}_j$ an den Rändern der Kontrollvolumina setze sich gemäß dem im nächsten Unterkapitel erläuterten Druckkorrekturalgorithmus nach Anany et al. [143] aus zwei Anteilen additiv zusammen. Ein Anteil nehme denjenigen Wert an, der sich bei Annahme eines linearen Verlaufes des konvektiven Flusses zwischen benachbarten Kontrollvolumina an der entsprechenden Stelle einstellt. Der andere Anteil ist eine Korrekturgröße, die auf dem Druck benachbarter Kontrollvolumina basiert. Die Bestimmungsgleichung für diese Korrekturgröße ist aus den Bilanzgleichungen für die gesamte Masse (3.37) und den Impuls (3.38) abgeleitet.

Der Diffusionsstrom an den Rändern der Kontrollvolumina ist unter der Annahme eines linearen Verlaufes der Bilanzgröße ϕ und der effektiven dynamischen Viskosität μ^{eff} zwischen den Mittelpunkten der Kontrollvolumina angenähert. Dementsprechend geht der in Bilanzgleichung (5.1) enthaltene Differentialquotient in einen Differenzenquotienten von Mittelpunktwerten über. [144]

Zur Approximation der gerichteten Strahlungsintensität \bar{I}_m an den Rändern der Kontrollvolumina und zur Berechnung der gerichteten Strahlungsintensität \bar{I}_m in den Mittelpunkten der Kontrollvolumina dient beim Discrete Ordinates Verfahren ein kombinierter Algorithmus. Dieser basiert darauf, dass die gerichtete Strahlungsintensität im Mittelpunkt eines Kontrollvolumens dem arithmetischen Mittelwert der gleichgerichteten Strahlungsintensitäten an jeweils zwei gegenüberliegenden Seitenflächen des Kontrollvolumens gleicht. Wird dieser Zusammenhang in Bilanzgleichung (5.2) entsprechend eingesetzt, so resultiert eine Bilanzgleichung, die neben der gerichteten Strahlungsintensität im Mittelpunkt eines Kontrollvolumens die gerichtete Strahlungsintensität an drei unterschiedlich orientierten Seitenflächen des Kontrollvolumens aufweist. Da die gerichteten Strahlungsintensitäten an den Rändern des Simulationsraumes über entsprechende Randbedingungen vorgegeben sind, dient diese Gleichung zur Bestimmung der gerichteten Strahlungsintensität im Mittelpunkt des entsprechenden Kontrollvolumens. Die Strahlungsintensitäten an den restlichen drei Rändern können anschließend mithilfe der arithmetischen Mittelwertbildung bestimmt werden. Auf diese Weise werden, angefangen mit den entsprechenden Kontrollvolumina in den Ecken des Simulationsraumes, alle benötigten Strahlungsintensitäten iterativ bestimmt. [140]

5.4 Lösung des Gleichungssystems

Das zu lösende Gesamtgleichungssystem unterscheidet sich gemäß den vorstehenden Erläuterungen dieses Kapitels in jeweils ein lineares Gleichungssystem je materiespezifischer Bilanzgröße, jeweils ein Gleichungssystem je gerichteter Strahlungsintensität und einzelne Gleichungen zur Bestimmung der übrigen Größen. Die aus den Bilanzgleichungen hervorgehenden Gleichungssysteme dienen der Bestimmung von Bilanzgrößen und werden in einer Iterationsschleife in folgender Reihenfolge nacheinander gelöst: Massenanteile \tilde{x}_b , gerichtete Strahlungsintensitäten \bar{I}_m , thermischer Anteil an der inneren Energie $\Delta\tilde{U}_{th}$, Geschwindigkeit \tilde{u}_i , Turbulenzenergie \tilde{k}_G und Dissipation ε_G^{Tu} . Die übrigen Größen werden vor oder nach der Lösung eines entsprechenden Gleichungssystems berechnet. Beispielsweise erfolgt die Bestimmung der Temperatur der Gasphase \tilde{T}_G nach der Berechnung des thermischen Anteils an der inneren Energie $\Delta\tilde{U}_{th}$. Diese iterative Vorgehensweise liegt in der Kopplung der verschiedenen Gleichungssysteme begründet und erfolgt solange, bis eine hinreichend genaue Lösung des Gesamtgleichungssystems erreicht ist. [145]

Um eine konvergente Lösungsbestimmung durchführen zu können, muss die Änderung der Bilanzgrößen während der oben erwähnten Iterationsschleife gedämpft werden. Dies erfolgt mithilfe eines bilanzgrößenspezifischen Relaxationsfaktors. Der Relaxationsfaktor entspricht dem Verhältnis aus der zu unternehmenden Änderung und der errechneten Änderung einer Bilanzgröße. [145]

Die Lösung der Gleichungssysteme zur Bestimmung der materiespezifischen Bilanzgrößen erfolge mithilfe des iterativen Bi-Conjugate Gradient Stabilized Algorithmus nach van der Vorst [146]. Die Auswahl dieses Algorithmus basiert auf dem Vergleich verschiedener iterativer Algorithmen zur Lösung linearer Gleichungssysteme, den Knaus [147] durchführte. Dieser Vergleich zeigt, dass das Konvergenzverhalten bei Anwendung des Bi-Conjugate Gradient Stabilized Algorithmus besser ist als bei Anwendung des Gauß-Seidel Algorithmus, der Strongly Implicit Procedure, des Conjugate Gradient Squared Algorithmus und des Generalized Minimum Residual Algorithmus (vgl. [147]).

Die Lösung der Gleichungssysteme zur Bestimmung der gerichteten Strahlungsintensitäten erfolgt mithilfe des im vorstehenden Unterkapitel beschriebenen Algorithmus des Discrete Ordinates Verfahrens, in dem die Berechnung und Approximation der Bilanzgröße vereint sind.

Das Gesamtgleichungssystem enthält keine Bestimmungsgleichung für den Druck \bar{p}_G^{wb} . Diesem Umstand ist durch die Anwendung eines Druckkorrekturalgorithmus begegnet: des auf Van Doormal und Raithby [148] zurückgehenden und von Date [149] und Anany et al. [143] modifizierten Semi

Implicit Method for Pressure Linked Equations Consistent Algorithmus, der im allgemeinen Sprachgebrauch als SIMPLEC-Algorithmus bezeichnet wird. Gemäß diesem Algorithmus werden nach der Berechnung der Geschwindigkeiten \tilde{u}_i durch die entsprechenden Gleichungssysteme Korrekturgrößen für den Druck \bar{p}_G^{wb} und die Geschwindigkeiten \tilde{u}_i bestimmt, um die die genannten Größen additiv korrigiert werden. Die zur Berechnung der Korrekturgrößen dienenden Zusammenhänge sind aus den Bilanzgleichungen für die gesamte Masse (3.37) und den Impuls (3.38) abgeleitet.

Zur Berechnung der Gasphasentemperatur \tilde{T}_G und der Partikeltemperaturen $\tilde{T}_{p,p}$ dienen Gleichungen, die in Tabelle 3.9 dargestellt und analytisch nicht lösbar sind. Daher erfolge die Berechnung mit dem Newton Verfahren.

6 Simulationsergebnisse

Da Mischungen aus Ibbenbürener Anthrazitkohle und Rheinischer Braunkohle im Kraftwerk Ibbenbüren bisher nicht verfeuert wurden, ist, wie in den Unterkapiteln 4.2 und 4.5 erwähnt, die Ausprägung von zwei anwendungsspezifischen Prozessmerkmalen nicht bekannt. Diese sind die Zusammensetzung des bei der Primärpyrolyse entstehenden Primärgases und die Staubfeinheit am Eintritt in den Feuerraum. Diesem Umstand ist begegnet, indem die Sensitivität der Simulationsergebnisse in Hinblick auf die genannten Prozessmerkmale analysiert und hierauf aufbauend deren Ausprägung für jene Berechnungen festgelegt ist, mithilfe derer die Vorgehensweise zur Simulation validiert und das Zünd- und Abbrandverhalten entsprechender Kohlemischungen untersucht ist. Die Festlegung der unbekanntenen Prozessmerkmale, die Validierung und die Erörterung des Zünd- und Abbrandverhaltens sind in jeweils einem der folgenden Unterkapitel aufgeführt.

6.1 Festlegung unbekannter, anwendungsspezifischer Prozessmerkmale

Die Sensitivitätsanalyse, auf der die Festlegung der unbekanntenen Prozessmerkmale aufbaut, erfolgt mittels Simulationen, denen zwecks einer verkürzten Berechnungsdauer ein kleinerer Simulationsraum zugrunde gelegt ist. Dieser Simulationsraum ist nebenstehend dargestellt. Er unterscheidet sich von dem Simulationsraum, der zur Validierung und Erörterung des Zünd- und Abbrandverhaltens dient und der in Abbildung 4-1 dargestellt ist, in einer seiner seitlichen Begrenzungen, die eine weitere zur Seitenwand parallele Schnittfläche ist.

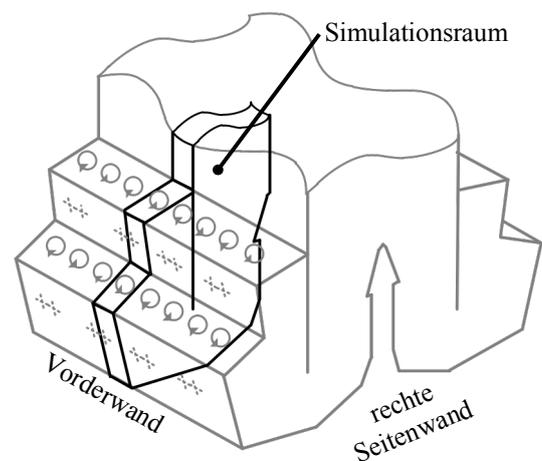


Abbildung 6-1: Simulationsraum bei der Sensitivitätsanalyse

Die Gestaltung der Sensitivitätsanalyse unterliegt den Grundsätzen der statistischen Versuchsplanung, die beispielsweise Siebertz et al. [150] erläuterten. Hierdurch wird der von den Prozessmerkmalen aufgespannte Versuchsbereich gleichmäßig und effizient untersucht. Jedes Prozessmerkmal erfahre zwei möglichst extreme Einstellungen: Der Anteil Rheinischer Braunkohle an der Feuerungswärmeleistung betrage 5% oder 40% und die Zusammensetzung der stickstoff- und schwefeldfreien Primärgase und die Staubfeinheiten gleichen den jeweiligen Extrema der korrespondierenden Größen H_u^{min} und H_u^{max} bzw. R_D^{min} und R_D^{max} , wie sie in Tabelle 4.1 und Tabelle 4.2 bzw. Abbildung 4-5 aufgeführt sind. Zur Kombination der Einstellungen diene ein Versuchsplan der Stufe V, sodass in Anlehnung an Siebertz et al. [151] die Auswirkungen der Prozessmerkmale auf den Zünd- und Abbrandvorgang aus statistischer Sicht ausreichend genau bestimmt werden. Der Versuchsplan enthält 16 Versuche, die nach Tabelle 6.1 in mehr als nur einem Prozessmerkmal voneinander abweichen.

Tabelle 6.1: Versuchsplan der Sensitivitätsanalyse

Versuchsnummer	FWL	Zusammensetzung des N-S-freien Primärgases		Staubfeinheit des Kohlenstaubes	
01	\dot{Q}_{RBK}^{min}	$H_{u,PIA}^{min}$	$H_{u,PRB}^{min}$	$R_{D,IAk}^{min}$	$R_{D,RBk}^{max}$
02	\dot{Q}_{RBK}^{max}	$H_{u,PIA}^{min}$	$H_{u,PRB}^{min}$	$R_{D,IAk}^{min}$	$R_{D,RBk}^{min}$
03	\dot{Q}_{RBK}^{min}	$H_{u,PIA}^{max}$	$H_{u,PRB}^{min}$	$R_{D,IAk}^{min}$	$R_{D,RBk}^{min}$
04	\dot{Q}_{RBK}^{max}	$H_{u,PIA}^{max}$	$H_{u,PRB}^{min}$	$R_{D,IAk}^{min}$	$R_{D,RBk}^{max}$
05	\dot{Q}_{RBK}^{min}	$H_{u,PIA}^{min}$	$H_{u,PRB}^{max}$	$R_{D,IAk}^{min}$	$R_{D,RBk}^{min}$
06	\dot{Q}_{RBK}^{max}	$H_{u,PIA}^{min}$	$H_{u,PRB}^{max}$	$R_{D,IAk}^{min}$	$R_{D,RBk}^{max}$
07	\dot{Q}_{RBK}^{min}	$H_{u,PIA}^{max}$	$H_{u,PRB}^{max}$	$R_{D,IAk}^{min}$	$R_{D,RBk}^{max}$
08	\dot{Q}_{RBK}^{max}	$H_{u,PIA}^{max}$	$H_{u,PRB}^{max}$	$R_{D,IAk}^{min}$	$R_{D,RBk}^{min}$
09	\dot{Q}_{RBK}^{min}	$H_{u,PIA}^{min}$	$H_{u,PRB}^{min}$	$R_{D,IAk}^{max}$	$R_{D,RBk}^{min}$
10	\dot{Q}_{RBK}^{max}	$H_{u,PIA}^{min}$	$H_{u,PRB}^{min}$	$R_{D,IAk}^{max}$	$R_{D,RBk}^{max}$
11	\dot{Q}_{RBK}^{min}	$H_{u,PIA}^{max}$	$H_{u,PRB}^{min}$	$R_{D,IAk}^{max}$	$R_{D,RBk}^{max}$
12	\dot{Q}_{RBK}^{max}	$H_{u,PIA}^{max}$	$H_{u,PRB}^{min}$	$R_{D,IAk}^{max}$	$R_{D,RBk}^{min}$
13	\dot{Q}_{RBK}^{min}	$H_{u,PIA}^{min}$	$H_{u,PRB}^{max}$	$R_{D,IAk}^{max}$	$R_{D,RBk}^{max}$
14	\dot{Q}_{RBK}^{max}	$H_{u,PIA}^{min}$	$H_{u,PRB}^{max}$	$R_{D,IAk}^{max}$	$R_{D,RBk}^{min}$
15	\dot{Q}_{RBK}^{min}	$H_{u,PIA}^{max}$	$H_{u,PRB}^{max}$	$R_{D,IAk}^{max}$	$R_{D,RBk}^{min}$
16	\dot{Q}_{RBK}^{max}	$H_{u,PIA}^{max}$	$H_{u,PRB}^{max}$	$R_{D,IAk}^{max}$	$R_{D,RBk}^{max}$

Die Auswirkung der unbekanntenen Prozessmerkmale auf den Zündvorgang ist anhand des sogenannten Flammenbeginns ausgewertet. Als Flammenbeginn ist der Abstand in Brennerachsenausrichtung zwischen der Einlassfläche des Kohlenstaub-Trägergas-Gemisches und jener Fläche definiert, an der der Massenanteil an mineralstoff- und wasserfreier Kohlesubstanz maximal ist. Diese Festlegung gründet auf dem Gedanken, dass die Fläche dieses Maximums ein charakteristisches Maß ist für den Ort der Primärpyrolyse, die unmittelbar vor der Zündung stattfindet.

Zur Analyse der Auswirkung der unbekanntenen Prozessmerkmale auf den Abbrandvorgang dient neben dem Glühverlust am Strahlungsraumende, der als Massenanteil an Unverbranntem in der Flugasche definiert ist, die sogenannte Flammenlänge. Als Flammenlänge ist die Entfernung in Brennerachsenausrichtung zwischen dem Ort des Flammenbeginns und jener Fläche definiert, die senkrecht zur Brennerachsenausrichtung liegt und in der der Massenanteil der mineralstofffreien Kokssubstanz in der Suspension unter einem per Augenmaß festgelegten Wert von 2,5% liegt. Die Definition von Flammenbeginn und -länge ist in den folgenden Abbildungen veranschaulicht.

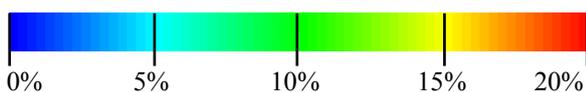
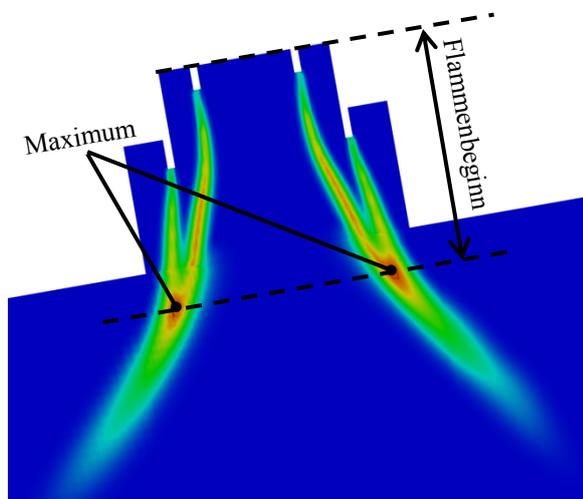


Abbildung 6-2: Massenanteil an mineralstoff- und wasserfreier Kohlesubstanz

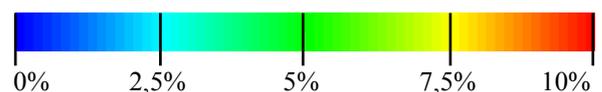
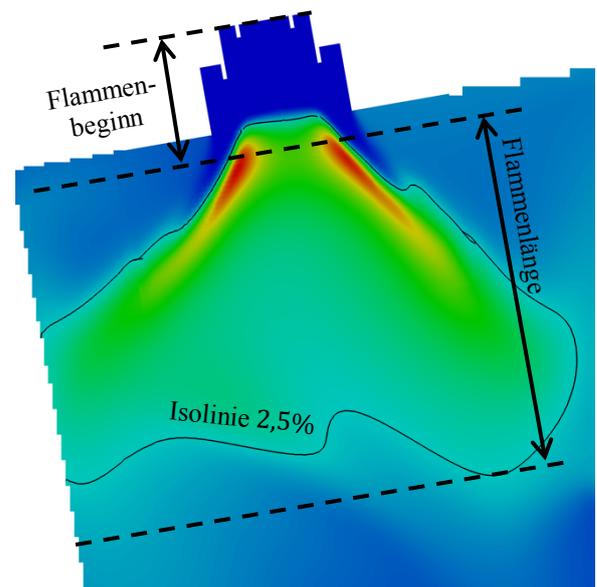


Abbildung 6-3: Massenanteil der mineralstofffreien Kokssubstanz

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse sind nachstehend veranschaulicht und erörtert. Die Diagramme zeigen die Veränderung von Flammenbeginn, Flammenlänge und Glühverlust über die

untersuchten Prozessmerkmale, gemittelt über den Anteil Rheinischer Braunkohle. Eine detailliertere Übersicht über die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse ist in Anhang F aufgeführt.

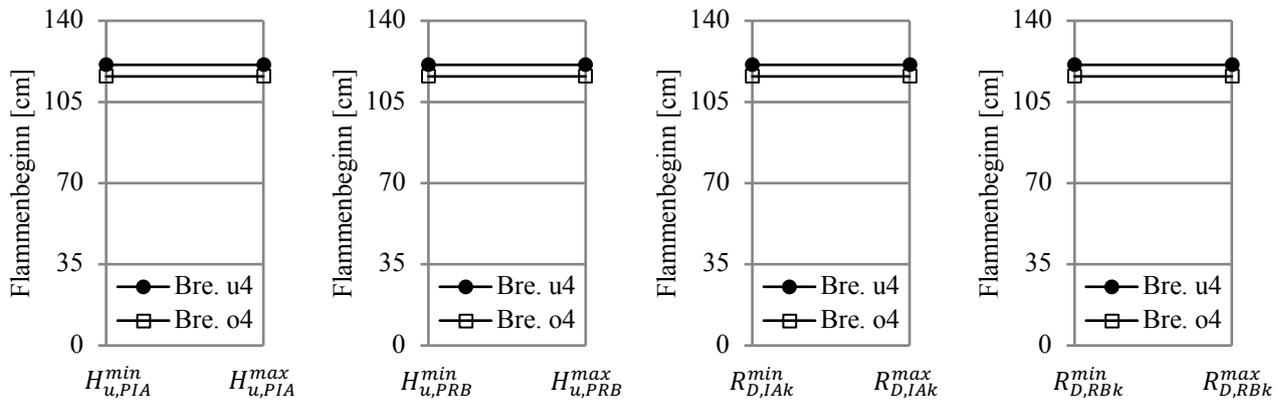


Abbildung 6-4: Auswirkung der Prozessmerkmale auf den Flammenbeginn

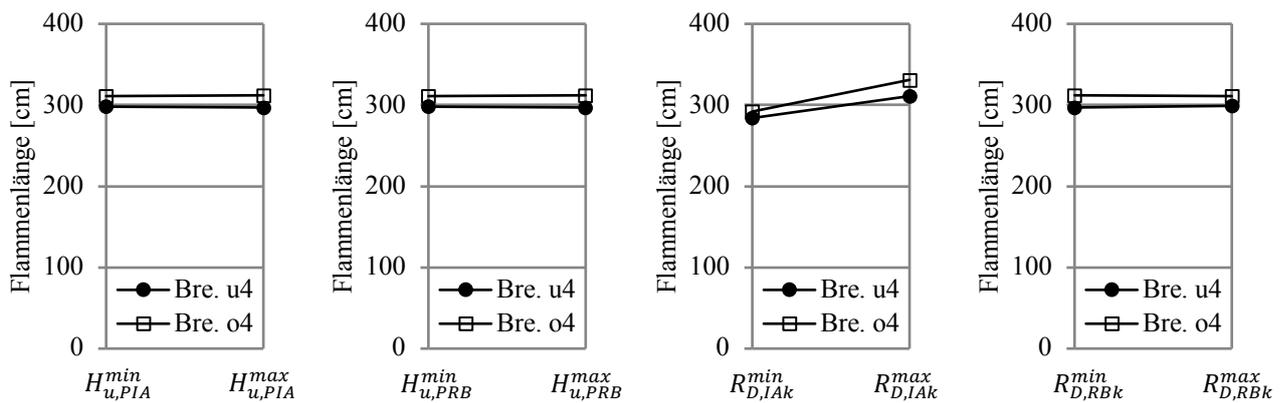


Abbildung 6-5: Auswirkung der Prozessmerkmale auf die Flammenlänge

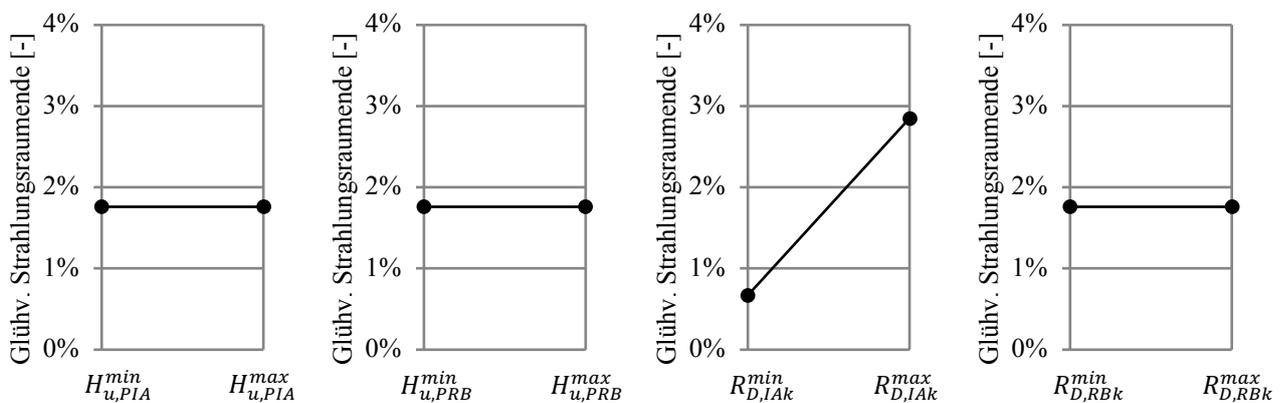


Abbildung 6-6: Auswirkung der Prozessmerkmale auf den Glühverlust am Strahlungsraumende

Eine Variation der Zusammensetzung der Primärgase wirkt sich auf das Zünd- und Abbrandverhalten kaum aus. Vor diesem Hintergrund kann die Zusammensetzung der Primärgase beider Kohlen innerhalb der physikalisch möglichen Grenzen frei gewählt werden, ohne dass der Zünd- und Abbrandprozess wesentlich beeinflusst wird. Für die Simulationen, auf denen die Validierung der Vorgehensweise zur Simulation und die Erörterung des Zünd- und Abbrandverhaltens basiert, entspricht die Zusammensetzung der Primärgase beider Kohlen den in Tabelle 4.1 genannten Zusammensetzungen.

Der Verlauf der Flammenlänge und des Glühverlustes über die Staubfeinheiten verdeutlichen, dass die Verbrennung langsamer abläuft, je gröber die Anthrazitkohle ausgemahlen ist. Die Ausmahlung der Rheinischen Braunkohle scheint keinen Einfluss auf die Verbrennung zu haben. Die Simulationen, auf denen die Validierung der Vorgehensweise zur Simulation und die Erörterung des Zünd- und Abbrandverhaltens basiert, erfolgen unter der Annahme einer betriebsüblichen Staubfeinheit für beide Kohlen, wie sie in Abbildung 4-5 aufgeführt ist.

6.2 Validierung der Vorgehensweise zur Simulation

Die Vorgehensweise zur Simulation beinhaltet einige Vereinfachungen, sodass eine entsprechende Validierung unumgänglich ist. Die Validierung erfolgt unter anderem durch eine Plausibilisierung der errechneten Flammenstruktur und einen Vergleich von Simulationsergebnissen mit verschiedenen Messergebnissen. Hierbei ist die Validierung auf den Fall einer Verfeuerung von ausschließlich Ibbenbürener Anthrazitkohle beschränkt, weil entsprechende Kohlemischungen mit Rheinischer Braunkohle im Kraftwerk Ibbenbüren bisher nicht eingesetzt wurden. Darüber hinaus ist die Güte der Aufbereitung und Lösung des Gleichungssystems anhand verschiedener Bilanzen bewertet.

Zur Plausibilisierung der Struktur der errechneten Flammen sind zunächst die grundlegenden Strömungsverhältnisse in den Feuerräumen beschrieben. Die nachfolgend dargestellten Strömungsfelder zeigen Geschwindigkeitsvektoren auf zu den Seitenwänden parallelen, die Brennerachsen enthaltenden Schnittflächen. Die Schnittflächen sind eingefärbt, sodass schwarze Vektoren einen dem Leser „entgegenkommenden“ Anteil enthalten. Den Strömungsfeldern nach ähneln sich die Strömungen hinter den Brennern. Sie lassen sich als verdrallte, kegelförmige Hauptströmung mit innerer Rezirkulation charakterisieren. Die Eindüsung der Tertiärluft hat einen deutlichen Einfluss auf die Strömung, indem sie die kegelförmigen Hauptströmungen in Richtung der inneren Trennwand ablenkt.

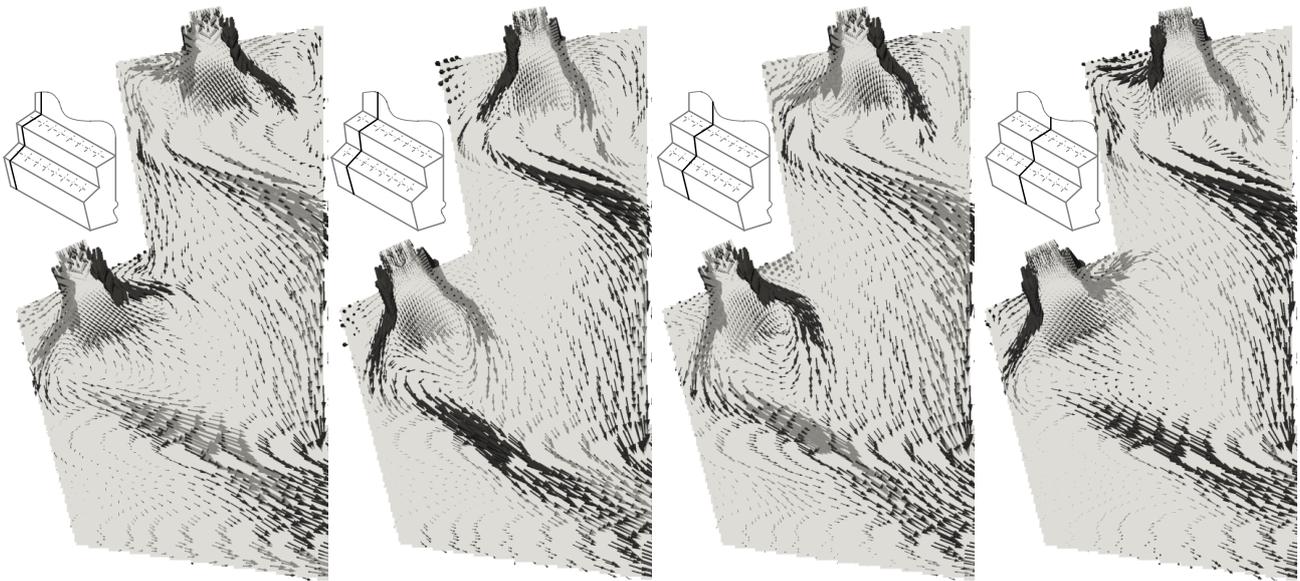


Abbildung 6-7: Strömungsfelder hinter den Brennern

Die Struktur der errechneten Flammen ist im nächsten Absatz exemplarisch für die Flamme hinter Brenner *o4* erörtert. Die Basis hierfür bilden die nachstehenden Abbildungen, die die Temperatur, die Geschwindigkeit parallel zur Brennerachse in Austrittsrichtung, den Massenanteil an mineralstoff- und wasserfreier Kohlesubstanz und den Massenanteil an mineralstofffreier Kokssubstanz in einer zu den Seitenwänden parallelen, die Rotationsachse des Brenners enthaltenden Schnittfläche darstellen. Die Abbildungen enthalten Isolinien der genannten Geschwindigkeit.

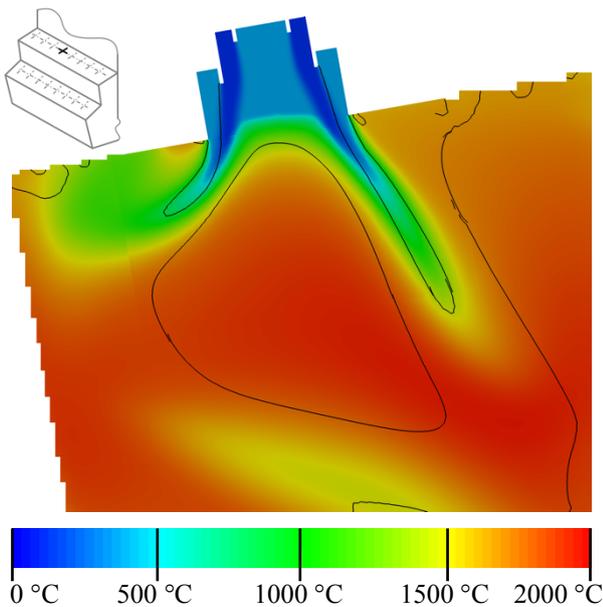


Abbildung 6-8: Temperatur

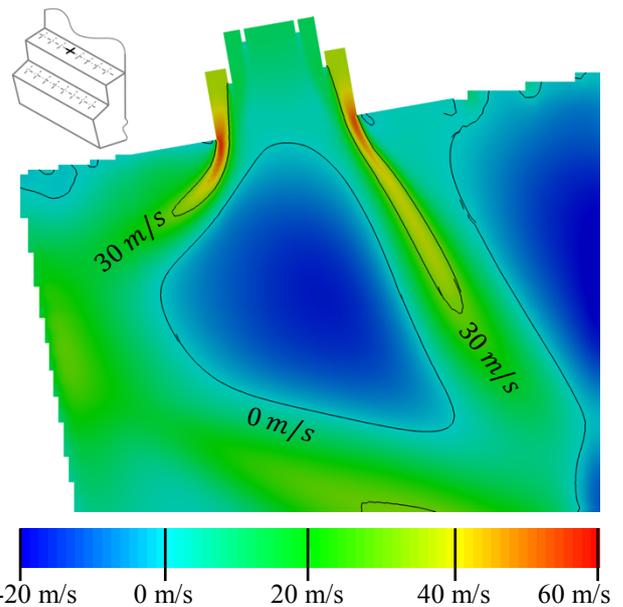


Abbildung 6-9: Geschwindigkeit in Austrittsrichtung parallel zur Brennerachse

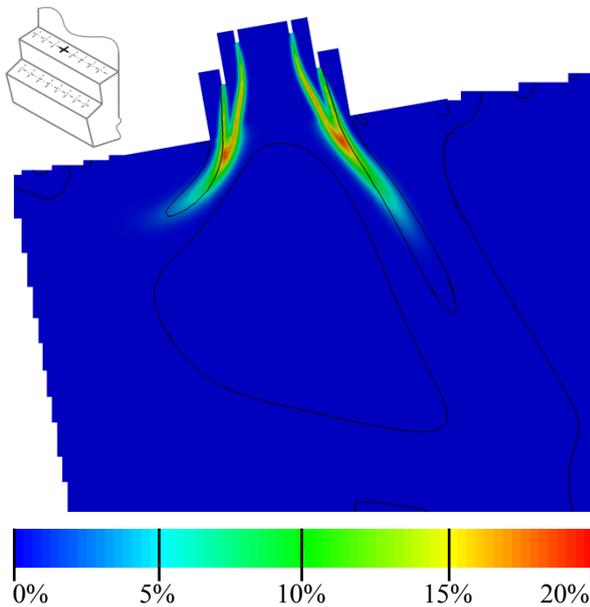


Abbildung 6-10: Massenanteil mineralstoff- und wasserfreie Kohlesubstanz

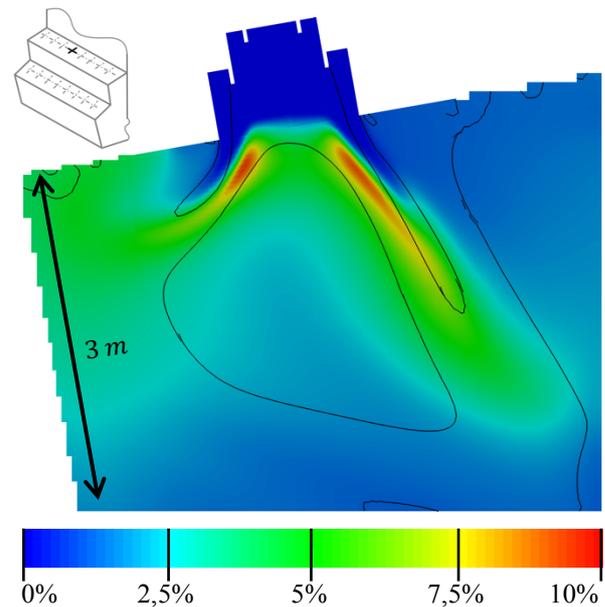


Abbildung 6-11: Massenanteil Kokssubstanz

Der hinter dem Einlass unveränderte Massenanteil an mineralstoff- und wasserfreier Kohlesubstanz zeigt, dass das Kohlenstaub-Trägergas-Gemisch in den Feuerraum eintritt, ohne dass der erste stoffliche Umwandlungsprozess, die Trocknung, einsetzt. Im weiteren Strömungsverlauf vermischt sich das Kohlenstaub-Trägergas-Gemisch an seiner Innenfläche mit Kühlluft und an seiner Außenfläche mit Sekundärluft. Diese Mischungen bewirken die vollständige Trocknung des Kohlenstaubes, wie der nahezu sprunghafte Anstieg des Massenanteils an mineralstoff- und wasserfreier Kohlesubstanz in diesen Mischzonen verdeutlicht. Der getrocknete Kohlenstaub strömt anschließend in einen Bereich, innerhalb dessen es zu einer Vermischung mit aus dem Innenvolumen der Flamme rezirkuliertem, heißerem Rauchgas kommt, was aus dem Profil der Geschwindigkeit in Austrittsrichtung hervorgeht. Diese Vermischung initiiert die Primärpyrolyse, aufgrund derer die mineralstoff- und wasserfreie Kohlesubstanz in mineralstofffreie Kokssubstanz umgewandelt wird. Daraufhin setzen verschiedene Verbrennungsreaktionen ein. In einer Entfernung von etwa 3 m zur Feuerraumdecke ist der Koks nahezu vollständig abgebrannt, was aus dem geringen Massenanteil an Koks in diesem Bereich von weniger als 2% hervorgeht. Die errechnete Flammenstruktur ist auf Basis der Ausführungen von Effenberger [152] und Zelkowski [153] plausibel.

Während des betriebsüblichen Volllastbetriebes wurden die auf trockenes Rauchgas bezogenen Volumenanteile an Sauerstoff und Kohlenstoffmonoxid hinter jeder Brennkammer an jeder Seitenwand an jeweils zwei Stellen ermittelt. Somit ergeben sich für den in Abbildung 4-1 dargestellten Simulationsraum zwei unterschiedliche Messpositionen, die mit A und B bezeichnet sind und für die jeweils

vier Messergebnisse vorliegen. Die Ergebnisse der Simulationsrechnung und der Messungen sind nachstehend aufgeführt.

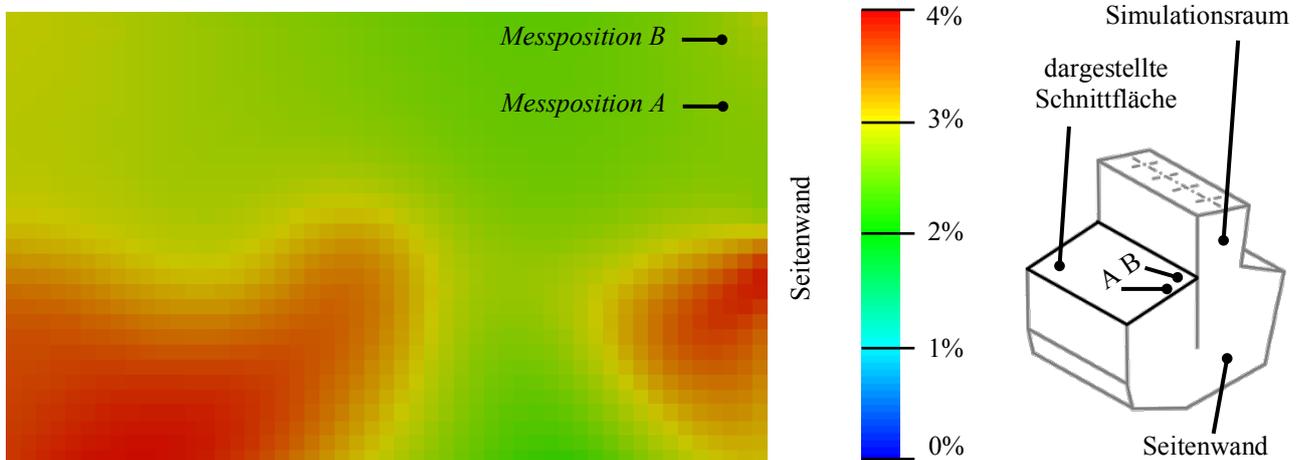


Abbildung 6-12: Volumenanteil Sauerstoff im trockenen Rauchgas

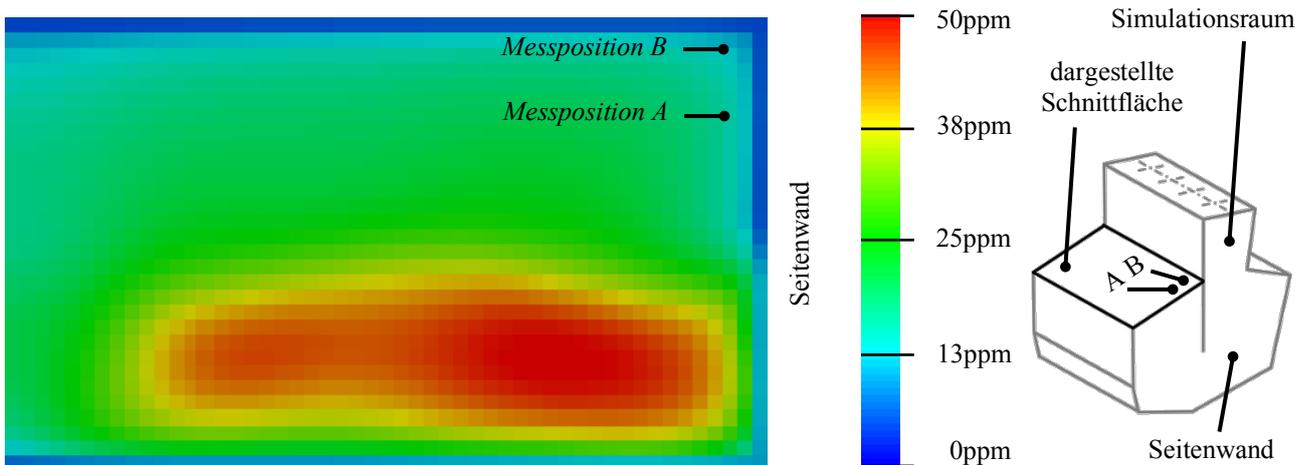


Abbildung 6-13: Volumenanteil Kohlenstoffmonoxid im trockenen Rauchgas

Tabelle 6.2: Messungen des Volumenanteils von Sauerstoff und Kohlenstoffmonoxid

Messposition	Messergebnisse Sauerstoff	Messergebnisse Kohlenstoffmonoxid
A	3,2%; 4,0%; 4,1%; 4,2%	9ppm; 37ppm; 65ppm; 69ppm
B	1,2%; 3,0%; 3,2%; 3,8%	4ppm; 14ppm; 14ppm

Die im Mittel gemessenen Sauerstoffgehalte von 3,9% an Position A und 2,8% an Position B sind größer als der errechnete Wert von 1,8% an beiden Positionen. Ebenso ist der im Mittel gemessene Kohlenstoffmonoxidgehalt von 45ppm an Position A größer als der errechnete Wert von 14ppm. Einzig der im Mittel gemessene Kohlenstoffmonoxidgehalt von 11ppm an Position B gleicht dem

errechneten Wert. Diesen Abweichungen steht gegenüber, dass der Berechnung nach beide Volumenanteile innerhalb der Messebene inhomogen verteilt sind. Unter Berücksichtigung dessen, dass die Berechnung den stationären Zustand und die Messergebnisse einen momentanen Zustand widerspiegeln und die Messergebnisse überwiegend im Wertebereich der Berechnung liegen, erscheinen die berechneten Volumenanteile für Sauerstoff und Kohlenstoffmonoxid auf der Schnittfläche plausibel.

In einer vergleichbaren Weise zu den voranstehenden Messungen wurden während des betriebsüblichen Volllastbetriebes die auf trockenes Rauchgas bezogenen Volumenanteile an Sauerstoff und Kohlenstoffmonoxid innerhalb einer höher liegenden Messebene aufgenommen. Die entsprechenden Mess- und Simulationsergebnis sind nachstehend dargestellt.

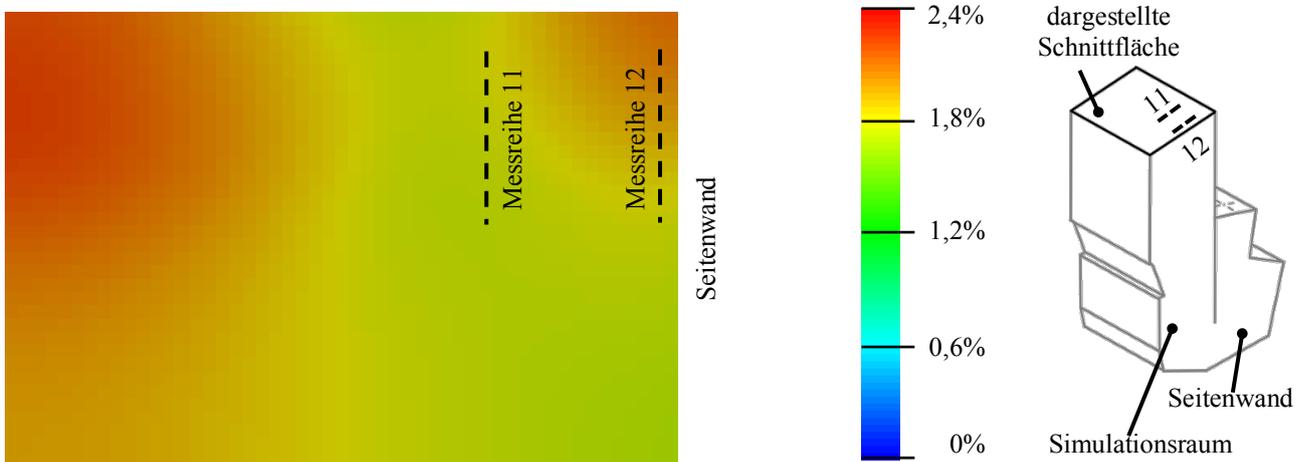


Abbildung 6-14: Volumenanteil Sauerstoff im trockenen Rauchgas

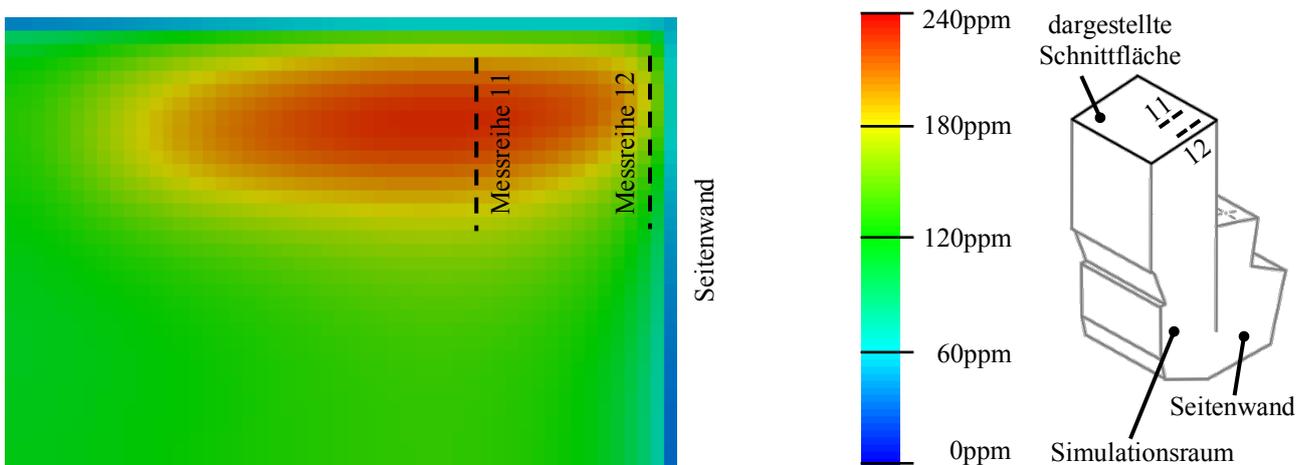


Abbildung 6-15: Volumenanteil Kohlenstoffmonoxid im trockenen Rauchgas

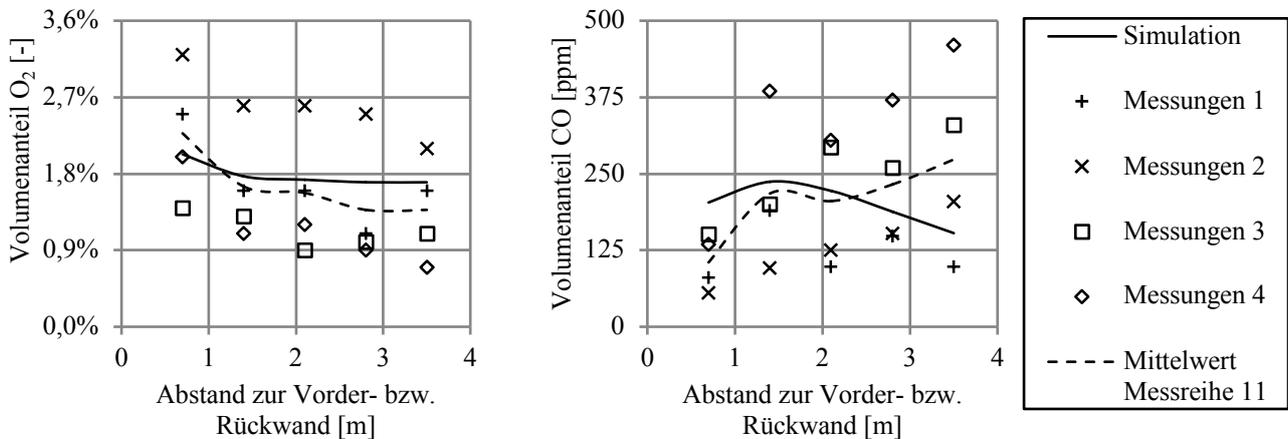


Abbildung 6-16: Volumenanteil Sauerstoff und Kohlenstoffmonoxid im trockenen Rauchgas

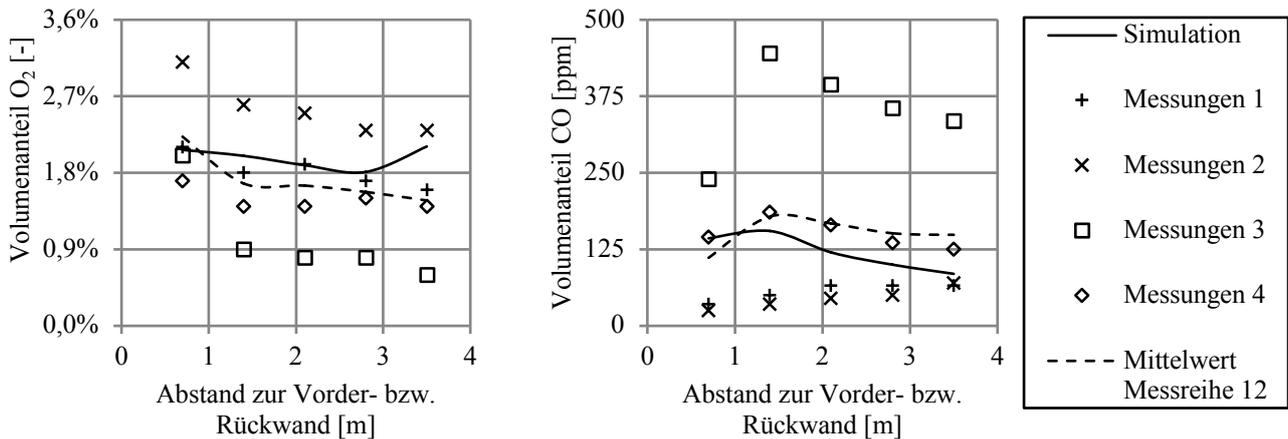


Abbildung 6-17: Volumenanteil Sauerstoff und Kohlenstoffmonoxid im trockenen Rauchgas

Aus den vorstehenden Abbildungen geht hervor, dass die Ergebnisse der Simulation im Schwankungsbereich der Ergebnisse der Messreihen liegen.

Ein weiterer Parameter, der zur Validierung der Vorgehensweise zur Simulation dient, ist die Rauchgastemperatur am Strahlungsraumende, die während des betriebsüblichen Vollastbetriebes an beiden Seitenwänden an jeweils zwei Positionen in unterschiedlichen Abständen zur Seitenwand aufgenommen wurde. Von den an den Messstellen gemittelten Temperaturen weichen die errechneten Temperaturen um etwa 5% nach unten ab, wie die nachfolgende Abbildung zeigt. Dies kann auf die nicht berücksichtigte Einstrahlung der Konvektivheizflächen in den Strahlungsraum oder eine entsprechende Ungenauigkeit von Mess- und Simulationsergebnissen zurückzuführen sein.

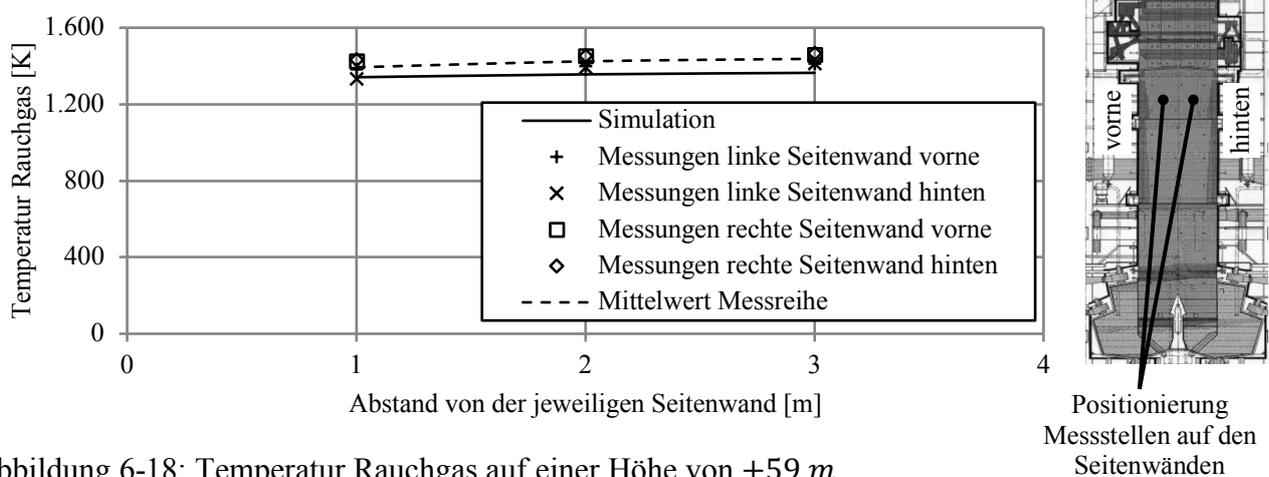


Abbildung 6-18: Temperatur Rauchgas auf einer Höhe von +59 m

Die Güte der Aufbereitung und Lösung des Gleichungssystems ist ausreichend groß zur Erfüllung der Aufgabenstellung. Diese Bewertung basiert auf der Bilanz verschiedener Größen über den Rand des Simulationsraumes. Eine Übersicht der erreichten Genauigkeit über alle im Rahmen dieser Arbeit erstellten Simulationsrechnungen zeigt die folgende Tabelle.

Tabelle 6.3: Güte der Aufbereitung und Lösung des Gleichungssystems

Größe	Bereich der auf den eintretenden Strom bezogenen Abweichung zwischen aus- und eintretendem Strom
Gesamtenergiestrom	$-2,00\% < \dots < 2,00\%$
Gesamtmassenstrom	$-0,001\% < \dots < 0,001\%$
Kohlenstoffmassenstrom	$-0,50\% < \dots < 0,50\%$
Wasserstoffmassenstrom	$-0,50\% < \dots < 0,50\%$
Sauerstoffmassenstrom	$-0,03\% < \dots < 0,03\%$
Aschemassenstrom	$-0,50\% < \dots < 0,50\%$

Die vorstehenden Ausführungen zeigen, dass Simulation und Realität hinreichend genau übereinstimmen, um die Auswirkung einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle auf den Zünd- und Abbrandvorgang zuverlässig bestimmen zu können.

6.3 Erörterung des Zünd- und Abbrandverhaltens

Einen ersten Eindruck, inwiefern eine Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle die Struktur der Flammen beeinflusst, vermittelt der nachfolgend dargestellte Verlauf des Flammenbeginns hinter jedem Brenner.

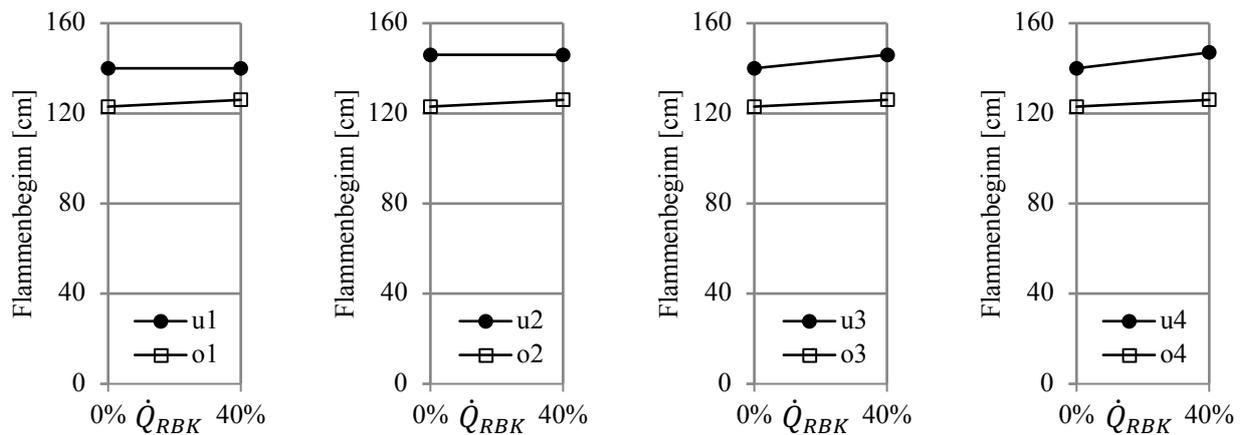


Abbildung 6-19: Auswirkung einer Mitverbrennung Rhein. Braunkohle auf den Flammenbeginn

Der Flammenbeginn hinter den oberen Brennern fällt etwas geringer aus als der Flammenbeginn hinter den unteren Brennern. Dieser Unterschied spiegelt sich in der Struktur der Flammen, wie sie im vorstehenden Unterkapitel erläutert und insbesondere durch Abbildung 6-7 visualisiert ist, nicht wieder: Alle Flammen haben die gleiche Struktur.

Die Veränderung des Flammenbeginns aufgrund einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle ist sehr gering. Dementsprechend laufen Trocknung und Primärpyrolyse weiterhin im gleichen Ortsbereich ab. In Anbetracht dessen, dass Rheinische Braunkohle wesentlich mehr Wasser enthält als Ibbenbürener Anthrazitkohle und deswegen mehr Energie zur Trocknung erforderlich ist, lässt die geringe Änderung des Flammenbeginns darauf schließen,

- dass der erhöhte Energiebedarf vernachlässigbar gering ist gegenüber der Energie, die durch den Strahlungswärmeaustausch und die Vermischung des Kohlenstaub-Trägergas-Gemisches mit Kühlluft an der Innenfläche und mit Sekundärluft an der Außenfläche an den Kohlenstaub übertragen wird und
- dass die Umgebungsbedingungen des Kohlenstaubes und damit das treibende Potential der Trocknung sich weiterhin so schnell ändern, dass die Trocknung nahezu sprunghaft abläuft.

Ursächlich für den unveränderten Flammenbeginn ist unter anderem, dass die Temperatur im Flammeninneren bei einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle bei allen Brennern nur um etwa $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ geringer und damit für die Trocknung nicht entscheidend anders ausfällt, wie die nachfolgenden Abbildungen am Beispiel von Brenner o3 veranschaulichen.

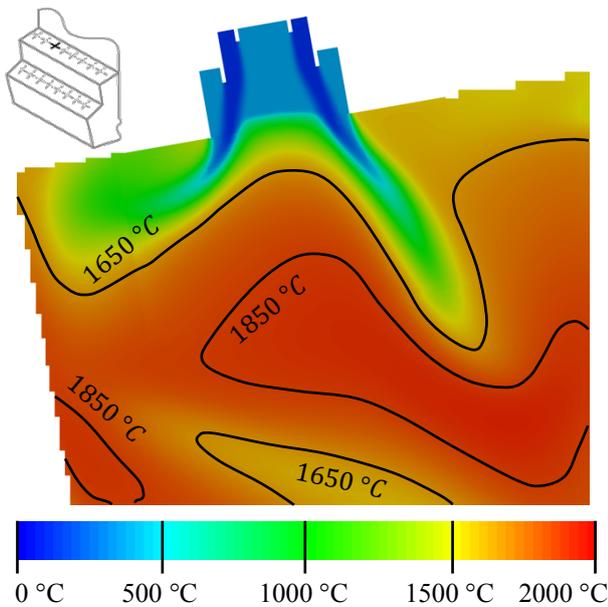


Abbildung 6-20: Temperatur hinter Brenner o3 bei $\dot{Q}_{RBK} = 0\%$

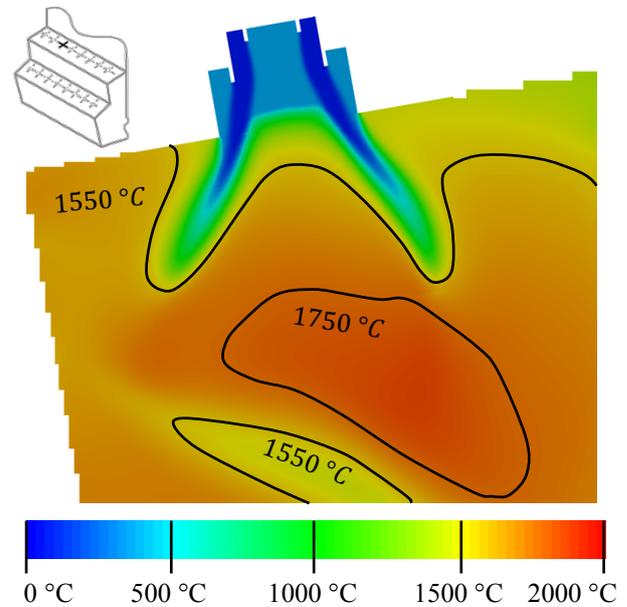


Abbildung 6-21: Temperatur hinter Brenner o3 bei $\dot{Q}_{RBK} = 40\%$

Der Temperaturabfall ist in Anbetracht dessen, dass die entsprechende adiabate Verbrennungstemperatur von $2030\text{ }^{\circ}\text{C}$ um $250\text{ }^{\circ}\text{C}$ auf $1780\text{ }^{\circ}\text{C}$ sinkt, vergleichsweise klein. Dies liegt an den sich ändernden Wärmeübertragungsverhältnissen innerhalb des Feuerraums, da eine Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle einen Rückgang der an die Feuerraumwände übertragenen Wärme bewirkt. Wird im betriebsüblichen Volllastbetrieb eine Wärme von 181 MW übertragen, davon 174 MW mittels Strahlung, sinkt die übertragene Wärme bei einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle auf 160 MW , davon 153 MW mittels Strahlung, wie die entsprechenden Simulationsrechnungen zeigen, wobei die Angaben für den simulierten Viertel-Dampferzeuger gemäß Abbildung 4-1 gelten. Inwiefern die Änderung der Wärmeübertragungsverhältnisse auf die Änderung des Absorptionskoeffizienten der verschiedenen Phasen entfällt, ist im Rahmen dieser Arbeit nicht näher erläutert.

Dem nahezu unveränderten Flammenbeginn bei Zugabe Rheinischer Braunkohle zum Trotz beeinflusst ihre Mitverbrennung die Flammenlänge, wie aus der nachstehenden Abbildung hervorgeht.

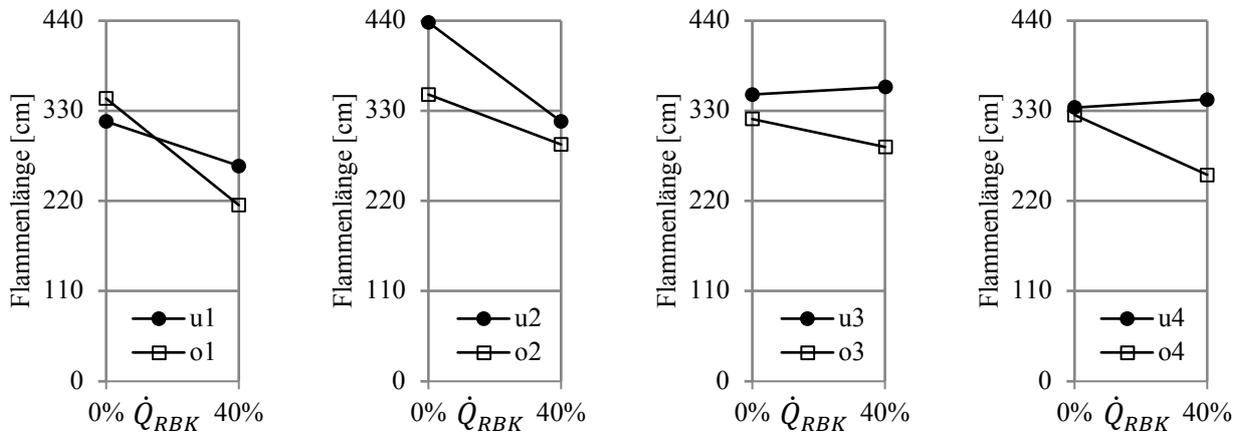


Abbildung 6-22: Auswirkung einer Mitverbrennung Rhein. Braunkohle auf die Flammenlänge

Die Veränderung der Flammenlänge ist zwar je nach Brenner unterschiedlich, doch ist eine Tendenz zu kleineren Flammenlängen erkennbar. Diese Tendenz rührt daher, dass bei einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle die Flammen weniger Koks enthalten. Die folgenden Abbildungen veranschaulichen dies, indem sie den Massenanteil an mineralstofffreier Kokssubstanz exemplarisch für die Flamme hinter Brenner o2 darstellen.

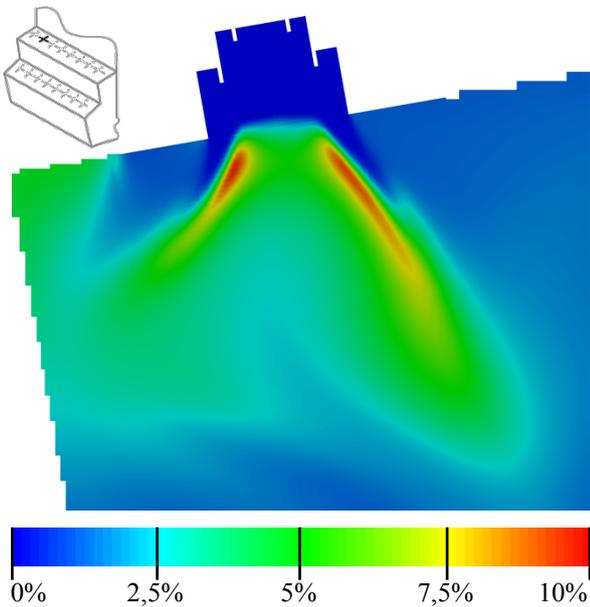


Abbildung 6-23: Massenanteil Kokssubstanz hinter Brenner o2 bei $\dot{Q}_{RBK} = 0\%$

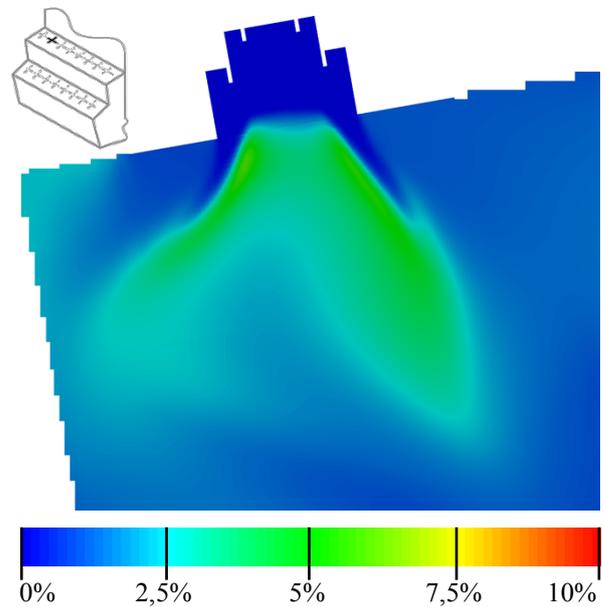


Abbildung 6-24: Massenanteil Kokssubstanz hinter Brenner o2 bei $\dot{Q}_{RBK} = 40\%$

Die Tendenz einer geringeren Koksmenge in den Flammen ist unter anderem darauf zurückzuführen, dass bei einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle weniger Koks entsteht. Dies geht aus den Ausführungen in Kapitel 4.5 hervor, die durch die folgende Abbildung illustriert sind.

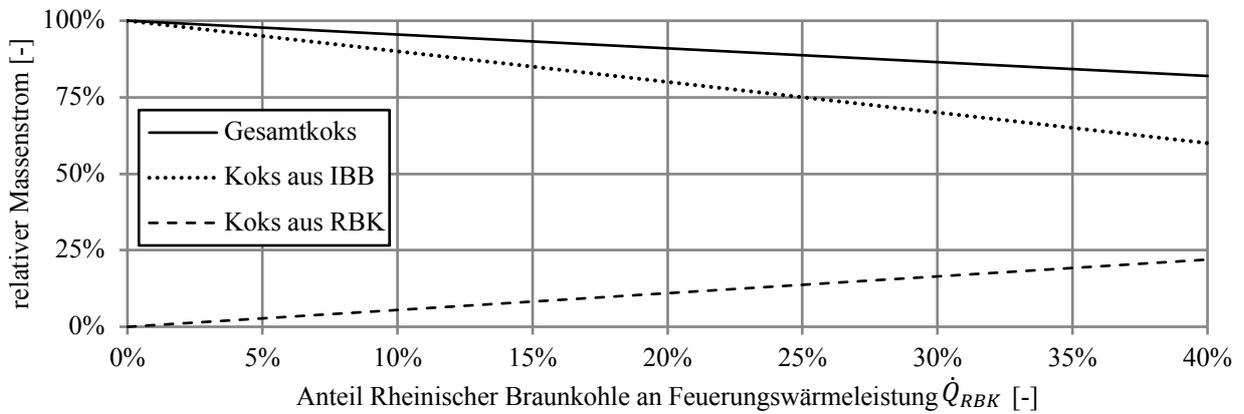


Abbildung 6-25: entstehender Massenstrom an mineralstofffreier Kokssubstanz

Darüber hinaus induziert auch ein schnellerer Abbrand des Kokes eine geringere Koksmenge in den Flammen. Hierzu tragen verschiedene Umstände bei. So treten bei der Primärpyrolyse von Rheinischer Braunkohle mehr brennbare Gase aus, die früher als der Koks zünden und abbrennen, wie die folgenden Abbildungen veranschaulichen. Die beim Abbrand dieser Gase freigesetzte Wärme führt dementsprechend zu einem früheren, schnelleren Koksabbrand.

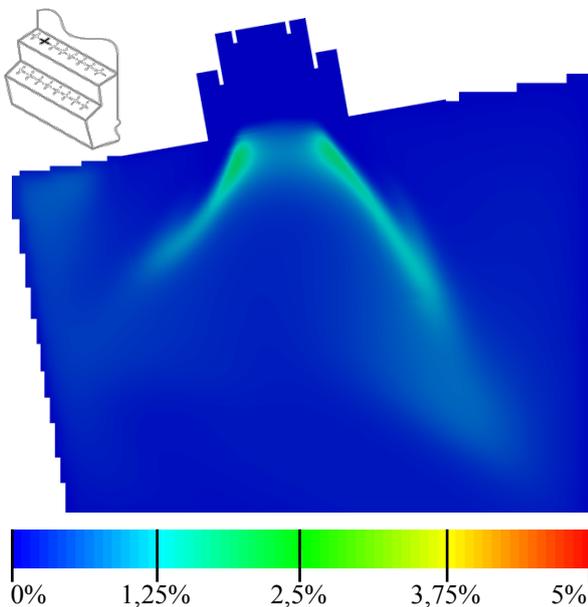


Abbildung 6-26: Massenanteil brennbarer Gase hinter Brenner o_2 bei $\dot{Q}_{RBK} = 0\%$

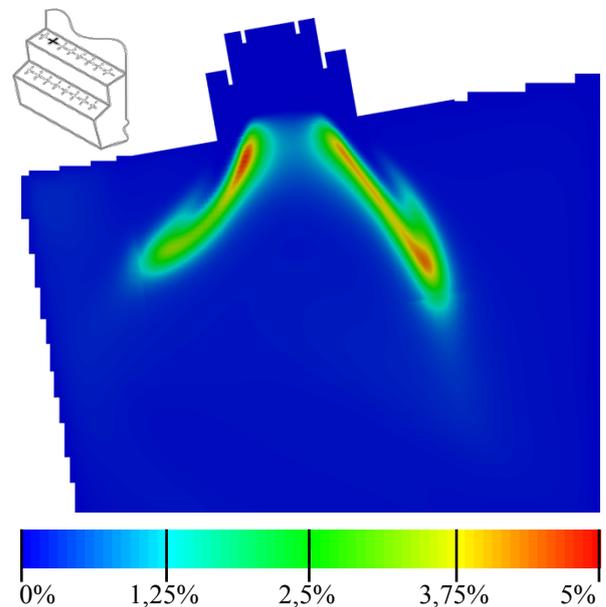


Abbildung 6-27: Massenanteil brennbarer Gase hinter Brenner o_2 bei $\dot{Q}_{RBK} = 40\%$

Ein schnellerer Koksabbrand ist auch dem Umstand geschuldet, dass Koks aus Rheinischer Braunkohle schneller abbrennt als Koks aus Ibbenbürener Anthrazitkohle, wie der nachfolgende Vergleich der Geschwindigkeitskonstanten des Koksabbrandes nach Gleichung (3.114) zeigt. Neben der

höheren Abbrandgeschwindigkeit des Braunkohlenkokes bewirkt die hiermit verbundene frühere Wärmefreisetzung einen schnelleren Abbrand des Kokes aus Ibbenbürener Anthrazitkohle.

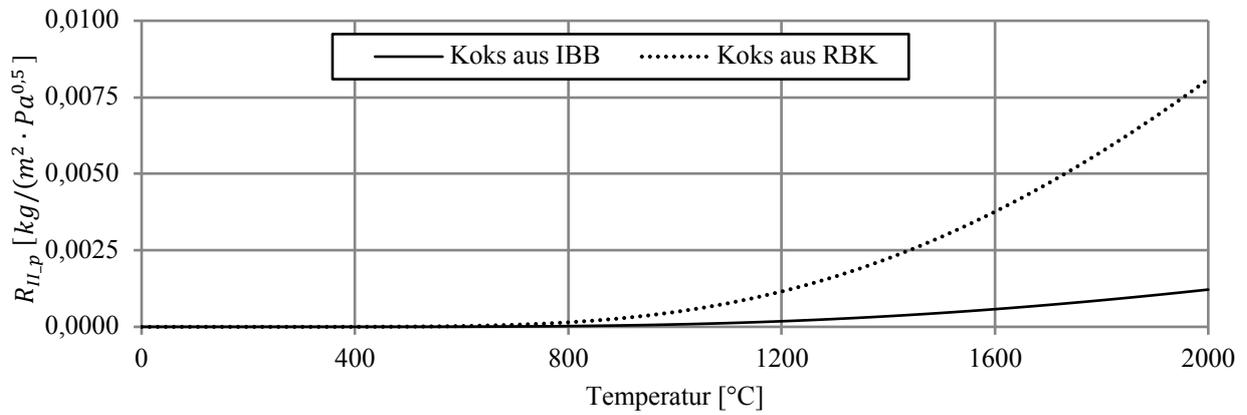


Abbildung 6-28: Vergleich der Geschwindigkeitskonstanten des Koksabbrandes $R_{II,p}$

Trotz des schnelleren Koksabbrandes steigt der Glühverlust am Strahlungsraumende bei einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle. Das folgende Diagramm stellt den Verlauf des Glühverlustes im Strahlungsraum dar.

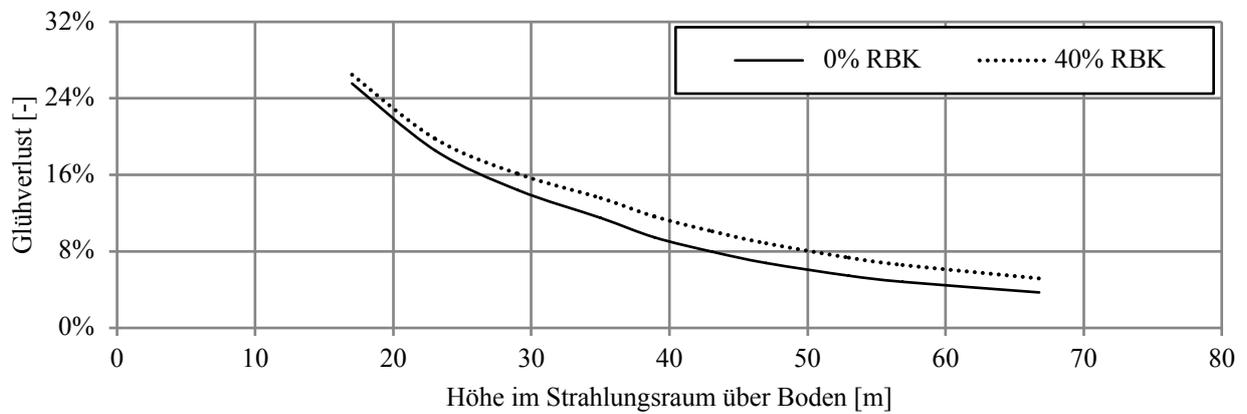


Abbildung 6-29: Glühverlust im Strahlungsraum

7 Zusammenfassung und Ausblick

Die RWE Generation SE erwägt zur Steigerung des Deckungsbeitrages des Kraftwerks Ibbenbüren, auf dem Bekohlungsweg dem Strom an Ibbenbürener Anthrazitkohle Rheinische Braunkohle gleichmäßig zuzumischen und dabei sowohl die installierte Anlagentechnik als auch die gegenwärtige Betriebsweise beizubehalten. Der Unterschied zwischen Anthrazit- und Braunkohle besteht in ihrem molekularen Aufbau, indem Anthrazitkohle mehr aus aromatischen Kohlenwasserstoffverbindungen und Braunkohle mehr aus aliphatischen Kohlenwasserstoffverbindungen besteht. Im unterschiedlichen molekularen Aufbau spiegelt sich eine unterschiedliche Ausprägung verschiedener Eigenschaften beider Kohlen wieder. So würde beispielsweise aufgrund des Heizwert-Unterschiedes bei Einsatz einer Mischung beider Kohlen der Massenstrom an Kohle markant steigen, während der Luftmassenstrom und die Summe beider Massenströme nahezu unverändert blieben. Unbekannt ist jedoch, inwiefern sich eine Zumischung Rheinischer Braunkohle auf den Verbrennungsprozess auswirken würde: ob beispielsweise ein größerer Anteil flüchtiger Bestandteile eine frühere Zündung der Anthrazitkohle bewirkt oder ob ein größerer Wassereintrag über eine mögliche Temperaturabsenkung die Zündung der Anthrazitkohle verzögert. Vor diesem Hintergrund besteht die Aufgabe dieser Arbeit, auf Basis entsprechender Simulationen zu erörtern, inwiefern entsprechende Kohlemischungen mit einem Feuerungswärmeanteil der Rheinischen Braunkohle von bis zu 40% im Dampferzeuger des Kraftwerks Ibbenbüren zünden und abbrennen würden. (siehe Kapitel 1)

Kohlenstaubverbrennungsprozesse zeichnet aus, dass die Kohle simultan gemahlen und vorgetrocknet wird, ehe sie mithilfe eines Trägergases in einen Feuerraum strömt. Im Feuerraum initiieren der Strahlungswärmeaustausch und die Vermischung des Kohlenstaub-Trägergas-Gemisches mit Rauchgas und Luft zunächst die vollständige Trocknung und die Primärpyrolyse, bei der die feste Kohlestruktur in Koks übergeht und die dabei entstehenden Gase und Teerstoffe der festen Struktur entweichen. Im weiteren Verlauf gehen die Teerstoffe während der Sekundärpyrolyse in Ruß und leichtere Gase über, während der Koks mit Sauerstoff überwiegend zu Kohlenstoffmonoxid reagiert. Die brennbaren Gase und Ruß verbrennen. (siehe Unterkapitel 2.1)

Im Kraftwerk Ibbenbüren ist zur Führung des Kohlenstaubverbrennungsprozesses eine Schmelzfeuerung installiert, die aus zwei identischen, spiegelsymmetrisch angeordneten Feuerräumen und einem mittig angeordneten Strahlungsraum besteht. Die Mahltrocknung erfolgt mittels acht Walzenschüsselmühlen. Jede Mühle ist an jeweils vier Stufenmischbrenner angeschlossen, die in zwei parallelen, vertikal versetzten Reihen in jeder Feuerraumdecke installiert sind. Durch die Brenner wird über das Kohlenstaub-Trägergas-Gemisch hinaus Sekundär- und Kühlluft in die Feuerräume eingeblasen. Weiterhin strömt über insgesamt 32, zu den Brennerachsen versetzten und nach unten geneigten Öffnungen Tertiärluft in die Feuerräume ein. Aufgrund der hohen Temperatur in den Feuerräumen schmelzen die Aschepartikel, weswegen entsprechende Auslässe in den Feuerraumböden ein Abfließen der flüssigen Asche ermöglichen. (siehe Unterkapitel 2.2)

Die im Rahmen dieser Arbeit erstellten Strömungssimulationen basieren auf einer Abstraktion des allgemeinen Kohlenstaubverbrennungsprozesses in der Detailtiefe der Molekularbewegung. Hierbei wird der physikalisch existierende Raum in Moleküle verschiedener Gase, verschiedene Partikel-bildende Molekülansammlungen und elektromagnetische Felder im Bereich der Wärmestrahlung unterschieden. Der gesamte Prozess ist durch ein System von vier Bilanzgleichungen beschrieben, die die Änderung der Masse jedes Bestandteils, des Impulses jeder Phase, der gesamten Energie jeder Phase und der spektralen Strahlungsdichte bilanzieren. (siehe Unterkapitel 3.1)

Zur Bewältigung der Aufgabenstellung genügt eine Betrachtung von in Zeit und Raum gemittelten Prozessgrößen, sodass aus der Prozessbeschreibung in der Detailtiefe der Molekularbewegung eine weniger detaillierte Prozessbeschreibung in der Detailtiefe der Strömungsbewegung abgeleitet ist. Die Ableitung gründet auf dem Gedanken, dass die sich ständig ändernde Translation der Moleküle eines Gases als Superposition einer über Zeit und Raum gemittelten Bewegung, der Molarbewegung, und einer dementsprechend fluktuierenden Bewegung, der Wärmebewegung, und dass die Molarbewegung wiederum als Superposition einer über Zeit und Raum gemittelten Bewegung, der Strömungsbewegung, und einer dementsprechend fluktuierenden Bewegung, der Turbulenz, aufgefasst werden kann. Die Unterscheidung von Strömungsbewegung und Turbulenz ist so gewählt, dass die Strömungsbewegung keine Funktion der Zeit ist. Mithilfe einiger Vereinfachungen ist das zugrundeliegende System von vier Bilanzgleichungen letztlich in ein System von sieben Bilanzgleichungen überführt, die die Änderung der Masse eines Bestandteils der Gasphase, der Masse eines Bestandteils der Partikelphase, der gesamten Masse, des gerichteten Impulses der Translation, der Turbulenzenergie, des thermischen Anteils der Änderung der inneren Energie und der spektralen Strahlungsdichte bilanzieren. (siehe Unterkapitel 3.2)

Das resultierende Gleichungssystem ist unterbestimmt. Seine Schließung erfolgt durch die Modellierung verschiedener Prozessmerkmale, die in anwendungsspezifische und nicht anwendungsspezifische Merkmale unterschieden sind. Zu den nicht anwendungsspezifischen Merkmalen zählen Merkmale hinsichtlich des Stoffverhaltens, wie die Annahme des idealen-Gas-Verhaltens, des Strömungsverhaltens, wie die Nutzung einer Variante des Standard k - ε -Modells, des Strahlungsverhaltens, wie die Annahme des grauen-Strahler-Verhaltens, und des Umwandlungsverhaltens, wie die Nutzung des Eddy Dissipation Concepts (siehe Unterkapitel 3.3). Unter die anwendungsspezifischen Merkmale fallen sowohl Randbedingungen, die durch den zu simulierenden Prozessraum und den Massenstrom und Zustand der eintretenden Ströme gegeben sind (siehe Unterkapitel 4.1 und 4.2), als auch Randbedingungen, die weitere Stoff-, Strahlungs- und Umwandlungsparameter beschreiben (siehe Unterkapitel 4.3 bis 4.5). Unbekannt bleiben die Zusammensetzung des bei der Primärpyrolyse entstehenden Gasgemisches und die Staubfeinheit am Eintritt in den Feuerraum, da Mischungen aus Ibbenbürener Anthrazitkohle und Rheinischer Braunkohle im Kraftwerk Ibbenbüren bisher nicht verfeuert wurden. Die Ausprägung dieser Prozessmerkmale ist im weiteren Verlauf dieser Arbeit festgelegt, indem die Sensitivität der Simulationsergebnisse in Hinblick auf die genannten Prozessmerkmale analysiert und hierauf aufbauend deren Ausprägung bestimmt ist.

Das durch die Modellierung der Prozessmerkmale geschlossene System der Bilanzgleichungen ist nicht lösbar. Diesem Umstand ist begegnet, indem die materiespezifischen Bilanzgleichungen nach dem Finite Volumen Verfahren und die Bilanzgleichung für die gerichtete Strahlungsintensität nach dem Discrete Ordinates Verfahren umgeformt sind. So entsteht ein System von linearen Gleichungssystemen, mithilfe dessen eine Näherung des Prozesszustandes an diskreten Stellen berechnet werden kann. Beide Verfahren beinhalten die Unterteilung des Simulationsraumes in nicht überlagerte Kontrollvolumina (siehe Unterkapitel 5.1), die Integration und Diskretisierung der für jedes Kontrollvolumen aufgestellten Bilanzgleichungen (siehe Unterkapitel 5.2) und die Approximation von Größen an den Rändern der Kontrollvolumina (siehe Unterkapitel 5.3).

Die linearen Gleichungssysteme werden aufgrund ihrer Kopplung in einer Iterationsschleife nacheinander gelöst, bis eine hinreichend genaue Lösung des gesamten Systems erreicht ist. Hierzu dienen ein durch das Discrete Ordinates Verfahren gegebener Algorithmus für die Bilanzgleichung der Strahlungsdichte und der Bi-Conjugate Gradient Stabilized Algorithmus für die übrigen Bilanzgleichungen. Weiterhin erfordert die Tatsache, dass für den Druck keine Bestimmungsgleichung gegeben ist, die Anwendung eines modifizierten Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations Consistent Algorithmus. (siehe Unterkapitel 5.4)

Die ersten 16 Simulationsrechnungen erfolgten im Rahmen der Sensitivitätsanalyse, die der Festlegung der unbekanntenen Prozessmerkmale dient und die gemäß den Grundsätzen der statistischen Versuchsplanung so gestaltet sind, dass die Auswirkungen der unbekanntenen Prozessmerkmale auf das Zünd- und Abbrandverhalten aus statistischer Sicht ausreichend genau bestimmt werden. Auf diese Weise wurde gezeigt, dass eine Variation der Zusammensetzung der Primärgase innerhalb der physikalisch sinnvollen Grenzen sowie eine Variation der Staubfeinheit der Rheinischen Braunkohle um $\pm 15\%$ das Zünd- und Abbrandverhalten kaum beeinflusst und dass eine gröbere Ausmahlung der Anthrazitkohle zu einer langsameren Verbrennung führt. Vor diesem Hintergrund erfolgten alle weiteren Simulationsrechnungen unter der Annahme einer betriebsüblichen Staubfeinheit für beide Kohlen. (siehe Unterkapitel 6.1)

Die Vorgehensweise zur Simulation beinhaltet einige Vereinfachungen, sodass eine entsprechende Validierung unumgänglich ist. Ein Vergleich der gemessenen und berechneten Rauchgastemperatur am Strahlungsraumende, eine Plausibilisierung der errechneten Flammenstrukturen und die Bilanz verschiedener Größen über den Rand des Simulationsraumes zeigen, dass mithilfe der erläuterten Vorgehensweise der Einfluss einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle auf das Zünd- und Abbrandverhalten zuverlässig analysiert werden kann. (siehe Unterkapitel 6.2)

Mithilfe entsprechender Simulationsrechnungen wurde dargelegt, dass der bei einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle erhöhte Energiebedarf zur Trocknung des Kohlenstaubes vernachlässigbar gering ist gegenüber der Energie, die durch den Strahlungswärmeaustausch und die Vermischung des Kohlenstaub-Trägergas-Gemisches mit Kühl- und Sekundärluft an den Kohlenstaub übertragen wird und dass die Trocknung und Primärpyrolyse weiterhin im gleichen Ortsbereich ablaufen. Ursächlich hierfür ist unter anderem ein Rückgang der von den Feuerraumwänden aufgenommenen Wärme, sodass die Temperatur im Flammeninneren bei einem Feuerungswärmeanteil der Rheinischen Braunkohle von 40% nur um etwa $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ geringer ausfällt. Weiterhin stellte sich heraus, dass die Flammen bei einer Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle tendenziell kürzer werden und weniger Koks enthalten. Dieser Umstand ist einem geringeren Entstehungsmassenstrom an Koks und einem schnelleren Abbrand des Kokes aus Rheinischer Braunkohle geschuldet. Trotz dieser schnelleren Verbrennung steigt der Glühverlust am Strahlungsraumende bei einem Feuerungswärmeanteil der Rheinischen Braunkohle von 40% von 3,7% auf 5,2% an. (siehe Unterkapitel 6.3)

Die Simulationsergebnisse zeigen, dass Kohlemischungen mit einem Feuerungswärmeanteil der Rheinischen Braunkohle von bis zu 40% im Dampferzeuger des Kraftwerks Ibbenbüren zünden und

abbrennen. Die Flammenlage und -struktur ändern sich nur unwesentlich, sodass die Gefährdung einer Überhitzung des Brennerbereiches oder eines Abhebens der Flamme nicht besteht. Durch die Änderung der Wärmeaufnahme der verschiedenen Abschnitte des Drucksystems und den höheren Glühverlust am Strahlungsraumende kann der Produktionsbetrieb positiv wie negativ beeinflusst werden. Beispielsweise könnten sich der Wärmeverlust durch das austretende Rauchgas, die Verschmutzungsneigung der Heizflächen oder die Nachverbrennung in den Konvektivheizflächen ändern. Eine Analyse dieser Einflüsse ist jedoch nicht Bestandteil dieser Arbeit.

Vor dem genannten Hintergrund ist eine Mitverbrennung Rheinischer Braunkohle mit einem Feuerungswärmeanteil von bis zu 40% aus feuerungstechnischer Sicht unbedenklich. Um die derzeit unbekannte Beeinflussung des Produktionsbetriebes zu ergründen, sind weitere Studien oder entsprechende Betriebsversuche erforderlich.

Literaturverzeichnis

- [1] **Van Krevelen, D. W.** *Coal*. 3. Aufl. Amsterdam: Elsevier, 1993. S. 193. ISBN 0-4444-89586-8.
- [2] **Wender, I.** Catalytic synthesis of chemicals from coal. *Catalysis Reviews: Science and Engineering*. 1976, Bd. 14, S. 97-129.
- [3] **Zelkowski, J.** *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*. 2. Aufl. Essen: VGB PowerTech Service GmbH, 2004. S. 45. ISBN 978-3-86875-216-8.
- [4] **DIN 51718.** *Bestimmung des Wassergehaltes und der Analysenfeuchtigkeit*. Juni 2002.
- [5] **DIN 51719.** *Bestimmung des Aschegehaltes*. Juli 1997.
- [6] **DIN 51720.** *Bestimmung des Gehaltes an Flüchtigen Bestandteilen*. März 2001.
- [7] **DIN 51733.** *Prüfung fester Brennstoffe – Bestimmung der Elementarzusammensetzung und Berechnung des Sauerstoffgehaltes*. April 2016.
- [8] **DIN 5499.** *Brennwert und Heizwert*. Januar 1972.
- [9] **Ikeda, M., et al.** Emission characteristics of NO_x and unburned carbon in fly ash during combustion of blends of bituminous/sub-bituminous coals. *Fuel*. 2003, Bd. 82, S. 1851–1857.
- [10] **Hashimoto, N. und Shirai, H.** Numerical simulation of sub-bituminous coal and bituminous coal mixed combustion employing tabulated-devolatilization-process model. *Energy*. 2014, Bd. 71, S. 399-413.
- [11] **Jüntgen, H.** Review of the kinetics of pyrolysis and hydrolyrolysis in relation to the chemical constitution of coal. *Fuel*. 1984, Bd. 63, S. 731-737.
- [12] **Solomon, P. R., Fletcher, T. H. und Pugmire, R. J.** Progress in coal pyrolysis. *Fuel*. 1993, Bd. 72, S. 587-597.

- [13] **Peters, W. und Jüntgen, H.** Die Diffusion als beherrschender Vorgang bei technischen Reaktionen an Kohle und Koks. *Brennstoff-Chemie*. 1965, Bd. 6, 46, S. 175-184.
- [14] **Serio, M. A., et al.** Kinetics of volatile product evolution in coal pyrolysis: experiment and theory. *Energy & Fuels*. 1987, Bd. 1, S. 138-152.
- [15] **Wen, W. Y. und Cain, E.** Catalytic pyrolysis of coal tar in a fixed-bed reactor. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*. 1984, Bd. 23, S. 627-637.
- [16] **Serio, M. A., Peters, W. A. und Howard, J. B.** Kinetics of vapor-phase secondary reactions of prompt coal pyrolysis tars. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. 1987, Bd. 26, S. 1831-1838.
- [17] **Ma, J.** *Soot formation during coal pyrolysis*. Dissertation Brigham Young University: 1996. S. 62.
- [18] **Chen, J. C. und Niksa, S.** Coal devolatilization during rapid transient heating.1. primary devolatilization. *Energy & Fuels*. 1992, Bd. 6, S. 254-264.
- [19] **Marlow, D., Niksa, S. und Kruger, C. H.** Secondary pyrolysis and combustion of coal volatiles. *Proceedings of the Combustion Institute*. 1992, Bd. 24, S. 1251-1258.
- [20] **Hausmann, G. J. und Kruger, C. H.** Evolution and reaction of coal fuel nitrogen during rapid oxidative pyrolysis and combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*. 1990, Bd. 23, S. 1265-1271.
- [21] **Zelkowski, J.** *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*. 2. Aufl. Essen: VGB PowerTech Service GmbH, 2004. S. 224. ISBN 978-3-86875-216-8.
- [22] **Arthur, J.** Reactions between carbon and oxygen. *Transactions of the Faraday Society*. 1951, Bd. 47, S. 164-178.
- [23] **Görner, K.** *Technische Verbrennungssysteme*. 1. Aufl. Stuttgart: Springer-Verlag, 1991. S. 193-194. ISBN 3-540-53947-6.
- [24] **Zelkowski, J.** *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*. 2. Aufl. Essen: VGB PowerTech Service GmbH, 2004. S. 354. ISBN 978-3-86875-216-8.
- [25] **Müller, H. und Wegmann, M.** Das Steinkohlenkraftwerk Ibbenbüren, Block B. *VGB Kraftwerkstechnik*. 1983, Bd. 63, 4, S. 275-286.

- [26] **Kiefer, D. und Grommes, H.** *Walzenschüsselmühle. EP0348659B1* 01.07.1988.
- [27] **Leikert, K.** Überlegungen zur Verfeuerung niederflüchtiger Kohlen und Ausführungsbeispiele in Schmelz- und Trockenfeuerungen. *VGB Kraftwerkstechnik*. 1983, Bd. 63, 9, S. 794-801.
- [28] **Einstein, A.** Über den Äther. *Verhandlungen der Schweizerischen Naturforschenden Gesellschaft*. 1924, Bd. 105, S. 85–93.
- [29] **Planck, M.** Ueber irreversible Strahlungsvorgänge. *Annalen der Physik*. 1900, Bd. 306, 1, S. 69-122.
- [30] **Czeslik, C., Seemann, H. und Winter, R.** *Basiswissen Physikalische Chemie*. 4. Aufl. Dortmund: Vieweg + Teubner, 2010. S. 23-25. ISBN 978-3-8348-0937-7.
- [31] **Clausius, R.** Über die Art der Bewegung, welche wir Wärme nennen. *Annalen der Physik*. 1857, Bd. 3, 176, S. 353-380.
- [32] **Kneer, R.** *Wärme- und Stoffübertragung*. Aachen: Lehrstuhl für Wärme- und Stoffübertragung, 2005. S. 20-21. Skript zur gleichnamigen Vorlesung.
- [33] **Baehr, H. D. und Stephan, K.** *Wärme- und Stoffübertragung*. 8. Aufl. Berlin: SpringerVieweg, 2013. S. 623-625. ISBN 978-3-642-36557-7.
- [34] **Baehr, H. D. und Stephan, K.** *Wärme- und Stoffübertragung*. 8. Aufl. Berlin: SpringerVieweg, 2013. S. 621. ISBN 978-3-642-36557-7.
- [35] **Schneider, R.** *Beitrag zur numerischen Berechnung dreidimensional reagierender Strömungen in industriellen Brennkammern*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1998. S. 88. ISBN 978-3-18-338506-5.
- [36] **Maxwell, J. C.** On the dynamical theory of gases. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*. 1867, 157, S. 49-88.
- [37] **Reynolds, O.** On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*. 1895, Bd. 186, S. 123-164.
- [38] **Siegel, R. und Howell, J. R.** *Thermal radiation heat transfer*. 3. Aufl. Washington D.C.: U.S. Government Printing Office, 1971. S. 33.

- [39] **Geller, W.** *Thermodynamik für Maschinenbauer: Grundlagen für die Praxis*. 5. Aufl. Lohmar: Springer-Verlag, 2018. S. 27. ISBN 978-3-662-44961-5.
- [40] **Spatschek, K.-H.** *Astrophysik: Eine Einführung in Theorie und Grundlagen*. 1. Aufl. Düsseldorf: Springer-Verlag, 2003. S. 99. ISBN 3-519-00452-6.
- [41] **Tennekes, H. und Lumley, J. L.** *A first course in turbulence*. 1. Aufl. Cambridge: MIT Press, 1972. S. 29-30. ISBN 978-0-26220-019-6.
- [42] **Wilcox, D. C.** *Turbulence modeling for CFD*. 3. Aufl. Glendale: DCW Industries, Inc., 2006. S. 39. ISBN 978-1-928729-08-2.
- [43] **Czichos, H. und Hennecke, M.** *HÜTTE - Das Ingenieurwesen*. 33. Aufl. Berlin: Springer Verlag, 2007. S. A164-A165. ISBN 978-3-540-71851-2.
- [44] **Schlichting, H. und Gersten, K.** *Grenzschicht-Theorie*. 10. Aufl. Bochum: Springer-Verlag, 2005. S. 505. ISBN 978-3-540-23004-5.
- [45] **Gerlinger, P.** *Numerische Verbrennungssimulation*. 1. Aufl. Stuttgart: Springer-Verlag, 2004. S. 36-37. ISBN 978-3-540-23337-4.
- [46] **Launder, B. E. und Spalding, D. B.** The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 1974, Bd. 3, S. 269-289.
- [47] **Vos, J. B.** *The calculation of turbulent reacting flows with a combustion model based on finite chemical kinetics*. Dissertation Universität Delft: 1987.
- [48] **Wilcox, D. C.** *Turbulence modeling for CFD*. 3. Aufl. Glendale: DCW Industries, Inc., 2006. ISBN 978-1-928729-08-2.
- [49] **Förtsch, D.** *A kinetic model of pulverised coal combustion for computational fluid dynamics*. Dissertation Universität Stuttgart: 2003. S. 36-37.
- [50] **Schnell, U.** *Berechnung der Stickoxidemissionen von Kohlenstaubfeuerungen*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1991. S. 47. ISBN 978-3-18-145006-2.
- [51] **Lucas, K.** *Thermodynamik*. 7. Aufl. Berlin: Springer, 2007. S. 218. ISBN 978-3-540-68645-3.
- [52] **DIN 1343.** *Referenzzustand, Normzustand, Normvolumen*. Januar 1990.

- [53] **Clausius, R.** Ueber die bewegende Kraft der Wärme und die Gesetze, welche sich daraus für die Wärmelehre selbst ableiten lassen. *Annalen der Physik*. 1850, Bd. 150, 3, S. 368-397.
- [54] **Baehr, H. D. und Kabelac, S.** *Thermodynamik*. 15. Aufl. Berlin, Heidelberg: SpringerVieweg, 2012. S. 208. ISBN 978-3-642-24160-4.
- [55] **Görner, K.** *Technische Verbrennungssysteme*. 1. Aufl. Stuttgart: Springer-Verlag, 1991. S. 125-127. ISBN 3-540-53947-6.
- [56] **Lucas, K.** *Thermodynamik*. 7. Aufl. Berlin: Springer, 2007. S. 176. ISBN 978-3-540-68645-3.
- [57] **Görres, J.** *Modellierung stark verdrallter Kohlenstaub-/Biomasseflammen mit der Methode der Finiten Elemente*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1996. S. 52-54. ISBN 978-3-18-334906-7.
- [58] **Baehr, H. D. und Stephan, K.** *Wärme- und Stoffübertragung*. 8. Aufl. Berlin: SpringerVieweg, 2013. S. 660. ISBN 978-3-642-36557-7.
- [59] **Doležal, F.** *Dampferzeugung: Verbrennung, Feuerung, Dampferzeuger*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1985. ISBN 13-978-3-540-13771-9.
- [60] **Kneer, R.** *Wärme- und Stoffübertragung*. Aachen: Lehrstuhl für Wärme- und Stoffübertragung, 2005. S. 129. Skript zur gleichnamigen Vorlesung.
- [61] **Herning, F. und Zipperer, L.** Beitrag zur Berechnung der Zähigkeit technischer Gasmische aus den Zähigkeitswerten der Einzelbestandteile. *Das Gas- und Wasserfach*. 1936, Bd. 4, 49.
- [62] **Wilke, C. R.** A viscosity equation for gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*. 1950, Bd. 18, S. 517.
- [63] **Schlichting, H. und Gersten, K.** *Grenzschicht-Theorie*. 10. Aufl. Bochum: Springer-Verlag, 2005. S. 63-64. ISBN 978-3-540-23004-5.
- [64] **Kneer, R.** *Wärme- und Stoffübertragung*. Aachen: Lehrstuhl für Wärme- und Stoffübertragung, 2005. S. 163-164. Skript zur gleichnamigen Vorlesung.
- [65] **Boussinesq, J.** Essai sur la théorie des eaux courantes. *Mémoires à l'Académie des Sciences*. 1877, Bd. 23, S. 1-680.

- [66] **Schlichting, H. und Gersten, K.** *Grenzschicht-Theorie*. 10. Aufl. Bochum: Springer-Verlag, 2005. S. 546. ISBN 978-3-540-23004-5.
- [67] **Gerlinger, P.** *Numerische Verbrennungssimulation*. Stuttgart: Springer-Verlag, 2004. S. 76-77. ISBN 978-3-540-23337-4.
- [68] **Görner, K.** *Technische Verbrennungssysteme*. 1. Aufl. Stuttgart: Springer-Verlag, 1991. S. 123-124. ISBN 3-540-53947-6.
- [69] **Wilcox, D. C.** *Turbulence modeling for CFD*. 3. Aufl. Glendale: DCW Industries, Inc., 2006. S. 130. ISBN 978-1-928729-08-2.
- [70] **Prandtl, L.** Untersuchungen zur ausgebildeten Turbulenz. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*. 1925, Bd. 5, S. 136-139.
- [71] **Prandtl, L.** Über ein neues Formelsystem für die ausgebildete Turbulenz. *Nachrichten der Akademie der Wissenschaften in Göttingen*. 1945, S. 6-19.
- [72] **Maxwell, J. C.** Illustrations of the dynamical theory of gases. *Philosophical Magazine*. 1860, Bd. 19, 124, S. 19-32.
- [73] **Taylor, G. I.** Statistical theory of turbulence. *Proceedings of the Royal Society*. 1935, Bd. A151, S. 421.
- [74] **Wilcox, D. C.** *Turbulence modeling for CFD*. 3. Aufl. Glendale: DCW Industries, Inc., 2006. S. 110-111. ISBN 978-1-928729-08-2.
- [75] **Gerlinger, P.** *Numerische Verbrennungssimulation*. Stuttgart: Springer-Verlag, 2004. S. 72. ISBN 978-3-540-23337-4.
- [76] **Schlichting, H. und Gersten, K.** *Grenzschicht-Theorie*. 10. Aufl. Bochum: Springer-Verlag, 2005. S. 510. ISBN 978-3-540-23004-5.
- [77] **Jones, W. P.** Models for turbulent flows with variable density and combustion. *Prediction Problems for Turbulent Flows*. 1980.
- [78] **Vos, J. B.** *The calculation of turbulent reacting flows with a combustion model based on finite chemical kinetics*. Dissertation Universität Delft: 1987. S. 42.
- [79] **Hogg, S. I.** *Second-moment-closure calculations of strongly-swirling confined flows with and without density variations*. Dissertation Universität Manchester: 1988. S. 91-92.

- [80] **Wilcox, D. C.** *Turbulence modeling for CFD*. 3. Aufl. Glendale: DCW Industries, Inc., 2006. S. 128-129. ISBN 978-1-928729-08-2.
- [81] **Hogg, S. I.** *Second-moment-closure calculations of strongly-swirling confined flows with and without density variations*. Dissertation Universität Manchester: 1988. S. 60-61.
- [82] **Kirchhoff, G.** Ueber das Verhältniss zwischen dem Emissionsvermögen und dem Absorptionsvermögen der Körper für Wärme und Licht. *Annalen der Physik*. 1860, Bd. 185, 2, S. 275-301.
- [83] **Siegel, R. und Howell, J. R.** *Thermal radiation heat transfer*. 3. Aufl. Washington D. C.: U.S. Government Printing Office, 1971. S. 39-40.
- [84] **Planck, M.** Ueber das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum. *Annalen der Physik*. 1901, Bd. 309, 3, S. 553-563.
- [85] **Baehr, H. D. und Stephan, K.** *Wärme- und Stoffübertragung*. 8. Aufl. Berlin: SpringerVieweg, 2013. S. 647-648. ISBN 978-3-642-36557-7.
- [86] **Siegel, R. und Howell, J. R.** *Thermal radiation heat transfer*. 3. Aufl. Washington D. C.: U.S. Government Printing Office, 1971. S. 20-21.
- [87] **Görner, K.** *Technische Verbrennungssysteme*. 1. Aufl. Stuttgart: Springer-Verlag, 1991. S. 289. ISBN 3-540-53947-6.
- [88] **Baehr, H. D. und Stephan, K.** *Wärme- und Stoffübertragung*. 8. Aufl. Berlin: SpringerVieweg, 2013. S. 654. ISBN 978-3-642-36557-7.
- [89] **Leiser, S.** *Numerical simulation of oxy-fuel combustion*. Dissertation Universität Stuttgart: Shaker, 2010. S. 73f. ISBN 978-3-8322-9722-0.
- [90] **Baehr, H. D. und Stephan, K.** *Wärme- und Stoffübertragung*. 8. Aufl. Berlin: SpringerVieweg, 2013. S. 726. ISBN 978-3-642-36557-7.
- [91] **Schneider, R.** *Beitrag zur numerischen Berechnung dreidimensional reagierender Strömungen in industriellen Brennkammern*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1998. S. 91-94. ISBN 978-3-18-338506-5.
- [92] **Lucas, K.** *Thermodynamik*. 7. Aufl. Berlin: Springer, 2007. S. 160-161. ISBN 978-3-540-68645-3.

- [93] **Lucas, K.** *Thermodynamik*. 7. Aufl. Berlin: Springer, 2007. S. 547. ISBN 978-3-540-68645-3.
- [94] **Baehr, H. D. und Stephan, K.** *Wärme- und Stoffübertragung*. 8. Aufl. Berlin: SpringerVieweg, 2013. S. 95. ISBN 978-3-642-36557-7.
- [95] **VDI Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen.** *VDI-Wärmeatlas*. 10. Aufl. Würzburg: Springer, 2006. S. Dca1. ISBN 978-3-642-19980-6.
- [96] **Kneule, F.** *Das Trocknen*. [Hrsg.] H. Mohler. 3. Aufl. Aarau: Verlag Sauerländer Aarau und Frankfurt am Main, 1974. S. 27. ISBN 3-7941-0429-3.
- [97] **Krischer, O. und Kast, W.** *Die wissenschaftlichen Grundlagen der Trocknungstechnik*. 3. Aufl. Darmstadt: Springer-Verlag, 1992. S. 48. ISBN 3-540-08280-8.
- [98] **Opdenwinkel, H.** *Über die Ermittlung der Bindungsenthalpie aus den Desorptionsisothermen einer rheinischen Braunkohle im Bereich höherer Temperaturen*. Dissertation RWTH Aachen: 1983.
- [99] **Grünekle, P.** *Zur Methansorption feuchter Steinkohlen*. Dissertation RWTH Aachen: 1969.
- [100] **Förtsch, D.** *A kinetic model of pulverised coal combustion for computational fluid dynamics*. Dissertation Universität Stuttgart: 2003. S. 41.
- [101] **Han, X.** *Modeling and simulation of SO_x and NO_x reduction processes in pulverized coal furnaces*. Dissertation Universität Stuttgart: Cuvillier, 2003. S. 23-24. ISBN 978-3-89873-938-2.
- [102] **Tan, V.** *Untersuchungen zur Aufteilung der stoffgebundenen Wärme bei der Pyrolyse von Braun- und Steinkohlen*. Dissertation Universität Clausthal: Papierflieger, 1996. S. 79-82. ISBN 978-3-931443-80-1.
- [103] **Tan, V.** *Untersuchungen zur Aufteilung der stoffgebundenen Wärme bei der Pyrolyse von Braun- und Steinkohlen*. Dissertation Universität Clausthal: Papierflieger, 1996. S. 24. ISBN 978-3-931443-80-1.
- [104] **Tan, V.** *Untersuchungen zur Aufteilung der stoffgebundenen Wärme bei der Pyrolyse von Braun- und Steinkohlen*. Dissertation Universität Clausthal: Papierflieger, 1996. S. 81-82. ISBN 978-3-931443-80-1.

- [105] **Fletcher, T. H., et al.** A chemical percolation model for devolatilization: summary. [Online] [Zitat vom: 11. 01 2015.] http://www.et.byu.edu/~tom/cpd/CPD_Summary.pdf.
- [106] **Förtsch, D., et al.** A kinetic model for the prediction of NO emissions from staged combustion of pulverized coal. *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*. 1998, S. 3037-3044.
- [107] **Badzioch, S. und Hawksley, G. W.** Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*. 1970, Bd. 9, 4, S. 521–530.
- [108] **Hamor, R. J., Smith, I. W. und Tyler, R. J.** Kinetics of combustion of pulverized brown coal char between 630 and 2200 K. *Combustion and Flame*. 1973, Bd. 21, S. 153-162.
- [109] **Schnell, U.** *Berechnung der Stickoxidemissionen von Kohlenstaubfeuerungen*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1991. S. 75-76. ISBN 978-3-18-145006-2.
- [110] **Förtsch, D.** *A kinetic model of pulverised coal combustion for computational fluid dynamics*. Dissertation Universität Stuttgart: 2003. S. 47.
- [111] **Förtsch, D.** *A kinetic model of pulverised coal combustion for computational fluid dynamics*. Dissertation Universität Stuttgart: 2003. S. 49-50.
- [112] **Förtsch, D.** *A kinetic model of pulverised coal combustion for computational fluid dynamics*. Dissertation Universität Stuttgart: 2003. S. 50-51.
- [113] **Förtsch, D.** *A kinetic model of pulverised coal combustion for computational fluid dynamics*. Dissertation Universität Stuttgart: 2003. S. 50-55.
- [114] **Magel, H.-C.** *Simulation chemischer Reaktionskinetik in turbulenten Flammen mit detaillierten und globalen Mechanismen*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI-Verlag, 1997. S. 39-42. ISBN 978-3-18-337706-0.
- [115] **Magnussen, B. F.** The eddy dissipation concept. *Proceedings of XI. Task Leaders Meeting, IEA*. 1989, S. 248-268.
- [116] **Schneider, R.** *Beitrag zur numerischen Berechnung dreidimensional reagierender Strömungen in industriellen Brennkammern*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1998. S. 135-136. ISBN 978-3-18-338506-5.

- [117] **Zimont, V. L. und Trushin, Z. M.** Total combustion kinetics of hydrocarbon fuels. *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 1969, Bd. 5, 4, S. 391-394.
- [118] **Howard, J. B., Williams, G. C. und Fine, D. H.** Kinetics of carbon monoxide oxidation in postflame fases. *Proceedings of the Combustion Institute*. 1972, Bd. 14, S. 975-986.
- [119] **Shaw, D. W., et al.** Determination of global kinetics of coal volatiles combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*. 1990, Bd. 23, S. 1155-1162.
- [120] **Magnussen, B. F.** The rate of combustion of soot in turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*. 1971, Bd. 13, 1, S. 869-877.
- [121] **Field, M. A., et al.** *Combustion of pulverised coal*. Leatherhead: British Coal Utilisation Research Association, 1967. S. 186-192.
- [122] **Smith, I. W.** The combustion rates of coal chars: a review. *Nineteenth Symposium (International) on Combustion*. 1982, S. 1045-1065.
- [123] **Zelkowski, J.** *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*. 2. Aufl. Essen: VGB PowerTech Service GmbH, 2004. S. 269-270. ISBN 978-3-86875-216-8.
- [124] **Zinser, W.** *Zur Entwicklung mathematischer Flammenmodelle für die Verfeuerung technischer Brennstoffe*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1985. S. 210-211. ISBN 978-3-18-147106-7.
- [125] **ANSYS, Inc.** *ANSYS FLUENT Theory Guide*. Aufl. 14.5. Canonsburg: 2012. S. 157.
- [126] **Rosin, P. O., Rammler, E. und Sperling, E.** Korngrößeprobleme des Kohlenstaubes und ihre Bedeutung für die Vermahlung. *Bericht C52 des Reichskohlenrates*. 1937.
- [127] **Schnell, U.** *Berechnung der Stickoxidemissionen von Kohlenstaubfeuerungen*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1991. S. 52. ISBN 978-3-18-145006-2.
- [128] **Ayling, A. B., Mulcahy, M. F. R. und Smith, I. W.** The temperature of burning pulverized coals. *International Flame Research Foundation, 2nd Members Conference*. 1971, Bd. 2, S. I1-I12.
- [129] **VDI Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen.** *VDI-Wärmeatlas*. 10. Aufl. Würzburg: Springer, 2006. S. Kc2. ISBN 978-3-642-19980-6.

- [130] **Baehr, H. D. und Stephan, K.** *Wärme- und Stoffübertragung*. 8. Aufl. Berlin: SpringerVieweg, 2013. S. 730-731. ISBN 978-3-642-36557-7.
- [131] **Baehr, H. D. und Stephan, K.** *Wärme- und Stoffübertragung*. 8. Aufl. Berlin: SpringerVieweg, 2013. S. 725. ISBN 978-3-642-36557-7.
- [132] **Leckner, B.** Spectral and total emissivity of water vapour and carbon dioxide. *Combustion and Flame*. 1972, Bd. 19, 1, S. 33-48.
- [133] **VDI Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen.** *VDI-Wärmeatlas*. 10. Aufl. Würzburg: Springer, 2006. S. Kd3-Kd5. ISBN 978-3-642-19980-6.
- [134] **Grant, D. M., et al.** Chemical model of coal devolatilization using percolation lattice statistics. *Energy & Fuels*. 1989, Bd. 3, S. 175-186.
- [135] **Genetti, D. B.** *An advanced model of coal devolatilization based on chemical structure*. Dissertation Brigham Young University: 1999.
- [136] **Zelkowski, J.** *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*. 2. Aufl. Essen: VGB PowerTech Service GmbH, 2004. S. 277. ISBN 978-3-86875-216-8.
- [137] **Chandrasekhar, S.** *Radiative Transfer*. London: Oxford at the Clarendon Press, 1950.
- [138] **Schneider, R.** *Beitrag zur numerischen Berechnung dreidimensional reagierender Strömungen in industriellen Brennkammern*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1998. S. 41-48. ISBN 978-3-18-338506-5.
- [139] **Schneider, R.** *Beitrag zur numerischen Berechnung dreidimensional reagierender Strömungen in industriellen Brennkammern*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1998. S. 15. ISBN 978-3-18-338506-5.
- [140] **Schneider, R.** *Beitrag zur numerischen Berechnung dreidimensional reagierender Strömungen in industriellen Brennkammern*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1998. S. 106-107. ISBN 978-3-18-338506-5.
- [141] **Schneider, R.** *Beitrag zur numerischen Berechnung dreidimensional reagierender Strömungen in industriellen Brennkammern*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1998. S. 19. ISBN 978-3-18-338506-5.
- [142] **Noll, B.** Evaluation of a bounded high-resolution scheme for combustor flow computations. *AIAA Journal*. 1992, Bd. 30, 1, S. 64-69.

- [143] **Anany, M. N., Schnell, U. und Scheffknecht, G.** Implementation of a smoothing pressure correction approach to the pressure-correction equation in order to maintain the use of SIMPLEC algorithms on non-staggered grids. *Progress in Computational Fluid Dynamics*. 2010, Bd. 10, 1, S. 40-50.
- [144] **Schneider, R.** *Beitrag zur numerischen Berechnung dreidimensional reagierender Strömungen in industriellen Brennkammern*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1998. S. 16-17. ISBN 978-3-18-338506-5.
- [145] **Schneider, R.** *Beitrag zur numerischen Berechnung dreidimensional reagierender Strömungen in industriellen Brennkammern*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 1998. S. 28-29. ISBN 978-3-18-338506-5.
- [146] **van der Vorst, H. A.** BI-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*. 1992, Bd. 13, 2, S. 631-644.
- [147] **Knaus, H.** *Simulation turbulenter reagierender Zweiphasenströmungen in industriellen Feuerungen mit komplexen Geometrien*. Dissertation Universität Stuttgart: VDI Verlag, 2001. S. 79. ISBN 978-3-18-344606-3.
- [148] **Van Doormal, J. P. und Raithby, G. D.** Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows. *Numerical Heat Transfer*. 7, 1984, Bd. 2, S. 147-163.
- [149] **Date, A. W.** Complete Pressure Correction Algorithm for Solution of Incompressible Navier-Stokes Equations on a non-staggered Grid. *Numerical Heat Transfer*. 1996, Bd. 29, 4, S. 441-458.
- [150] **Siebertz, K., van Bebber, D. und Hochkirchen, T.** *Statistische Versuchsplanung*. 2. Aufl. Aachen: Springer Vieweg, 2017. ISBN 978-3-642-05492-1.
- [151] **Siebertz, K., van Bebber, D. und Hochkirchen, T.** *Statistische Versuchsplanung*. 2. Aufl. Aachen: Springer Vieweg, 2017. S. 31. ISBN 978-3-642-05492-1.
- [152] **Effenberger, H.** *Dampferzeugung*. Berlin: Springer, 2000. S. 349. ISBN 3-540-64175-0.
- [153] **Zelkowski, J.** *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*. 2. Aufl. Essen: VGB PowerTech Service GmbH, 2004. S. 376. ISBN 978-3-86875-216-8.

-
- [154] **Fachverband Dampfkessel-, Behälter- und Rohrleitungsbau e.V.** *FDBR-Handbuch Wärme- und Strömungstechnik*. Essen: 2009.
- [155] **Zelkowski, J.** *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*. 2. Aufl. Essen: VGB PowerTech Service GmbH, 2004. S. 93. ISBN 978-3-86875-216-8.
- [156] **Zelkowski, J.** *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*. 2. Aufl. Essen: VGB PowerTech Service GmbH, 2004. S. 68. ISBN 978-3-86875-216-8.
- [157] **Zelkowski, J.** *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*. 2. Aufl. Essen: VGB PowerTech Service GmbH, 2004. S. 61. ISBN 978-3-86875-216-8.
- [158] **Modest, M.** *Radiative heat transfer*. 2. Aufl. The Pennsylvania State University: Academic press, 2003. S. 341-344. ISBN 0-12-503163-7.

Anhang

A Ableitung der Bilanzgleichungen der exakten Strömungsbewegung

A.1 Wiederkehrende Umformungen

Reynoldssches Transporttheorem

$$d[\Phi \cdot dV] = \frac{\partial}{\partial t} [\Phi \cdot dV] \cdot dt + \frac{\partial}{\partial x_j} [\Phi \cdot dV] \cdot dx_j$$

$$\begin{aligned} d[\Phi \cdot dV] &= \frac{\partial}{\partial t} [dV] \cdot \Phi \cdot dt + \frac{\partial}{\partial t} [\Phi] \cdot dV \cdot dt \\ \Leftrightarrow &+ \frac{\partial}{\partial x_j} [\Phi] \cdot dV \cdot dx_j + \frac{\partial}{\partial x_j} [dV] \cdot \Phi \cdot dx_j \end{aligned}$$

$$\text{mit } \frac{\partial}{\partial t} [dV] = 0$$

$$\Leftrightarrow d[\Phi \cdot dV] = \frac{\partial[\Phi]}{\partial t} \cdot dV \cdot dt + \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} \cdot dV \cdot dx_j + \frac{\partial[dV]}{\partial x_j} \cdot \Phi \cdot dx_j$$

$$\text{mit } \frac{\partial[dV]}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [dA \cdot dx_j] = \frac{\partial}{\partial x_j} [\mathbf{u}_j \cdot dt] \cdot dA = \frac{\partial}{\partial x_j} [\mathbf{u}_j] \cdot dA \cdot dt$$

$$\Leftrightarrow d[\Phi \cdot dV] = \frac{\partial}{\partial t} [\Phi] \cdot dV \cdot dt + \frac{\partial}{\partial x_j} [\Phi] \cdot dV \cdot dx_j + \frac{\partial}{\partial x_j} [\mathbf{u}_j] \Phi \cdot dA \cdot dt \cdot dx_j$$

$$\Leftrightarrow d[\Phi \cdot dV] = \frac{\partial}{\partial t} [\Phi] \cdot dV \cdot dt + \frac{\partial}{\partial x_j} [\Phi] \cdot dV \cdot dx_j + \frac{\partial}{\partial x_j} [\mathbf{u}_j] \Phi \cdot dV \cdot dt$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt} [\Phi \cdot dV] = \frac{\partial}{\partial t} [\Phi] \cdot dV + \frac{\partial}{\partial x_j} [\Phi] \mathbf{u}_j \cdot dV + \frac{\partial}{\partial x_j} [\mathbf{u}_j] \Phi \cdot dV$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt} [\Phi \cdot dV] = \frac{\partial}{\partial t} [\Phi] \cdot dV + \frac{\partial}{\partial x_j} [\Phi \mathbf{u}_j] \cdot dV \tag{A.1}$$

Mittelwert des Mittelwertes

1) gemäß (3.9); 2) gemäß (3.10); 3) gemäß (3.16); 4) gemäß (3.17)

$$1) \quad (\widehat{\Phi}) = \frac{\int_X W b_{(X_1)} [\widehat{\Phi}(X)] \cdot dX}{\int_X W b_{(X_1)} [1] \cdot dX}$$

$$2) \quad (\overline{\Phi}) = \frac{\int_X T u_{(X_1)} [\overline{\Phi}(X)] \cdot dX}{\int_X T u_{(X_1)} [1] \cdot dX}$$

$$3) \quad (\widetilde{\Phi}) = \frac{\int_X W b_{(X_1)} [\rho(X) \cdot \widetilde{\Phi}(X)] \cdot dX}{\int_X W b_{(X_1)} [\rho(X)] \cdot dX}$$

$$4) \quad (\widetilde{\Phi}) = \frac{\int_X T u_{(X_1)} [\rho(X) \cdot \widetilde{\Phi}(X)] \cdot dX}{\int_X T u_{(X_1)} [\rho(X)] \cdot dX}$$

1), 3) mit (3.13); 2), 4) mit (3.14)

$$\Leftrightarrow 1) \quad (\widehat{\Phi}) = \widehat{\Phi} \frac{\int_X W b_{(X_1)} [1] \cdot dX}{\int_X W b_{(X_1)} [1] \cdot dX} = \widehat{\Phi} \quad (\text{A.2})$$

$$\Leftrightarrow 2) \quad (\overline{\Phi}) = \overline{\Phi} \frac{\int_X T u_{(X_1)} [1] \cdot dX}{\int_X T u_{(X_1)} [1] \cdot dX} = \overline{\Phi} \quad (\text{A.3})$$

$$\Leftrightarrow 3) \quad (\widetilde{\Phi}) = \widetilde{\Phi} \frac{\int_X W b_{(X_1)} [\rho(X)] \cdot dX}{\int_X W b_{(X_1)} [\rho(X)] \cdot dX} = \widetilde{\Phi} \quad (\text{A.4})$$

$$\Leftrightarrow 4) \quad (\widetilde{\Phi}) = \widetilde{\Phi} \frac{\int_X T u_{(X_1)} [\rho(X)] \cdot dX}{\int_X T u_{(X_1)} [\rho(X)] \cdot dX} = \widetilde{\Phi} \quad (\text{A.5})$$

Fluktuation des Mittelwertes

1) gemäß (3.11); 2) gemäß (3.12); 3) gemäß (3.18); 4) gemäß (3.19)

$$1) \quad (\widehat{\Phi})' = \widehat{\Phi} - (\widehat{\Phi})$$

$$2) \quad (\overline{\Phi})'' = \overline{\Phi} - \overline{(\overline{\Phi})}$$

$$3) \quad (\check{\Phi})^* = \check{\Phi} - (\check{\Phi})$$

$$4) \quad (\widetilde{\Phi})^{**} = \widetilde{\Phi} - (\widetilde{\Phi})$$

1) mit (A.2); 2) mit (A.3); 3) mit (A.4); 4) mit (A.5)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\Phi})' = \widehat{\Phi} - \widehat{\Phi}$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} (\overline{\Phi})'' = \overline{\Phi} - \overline{\Phi}$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} (\check{\Phi})^* = \check{\Phi} - \check{\Phi}$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} (\widetilde{\Phi})^{**} = \widetilde{\Phi} - \widetilde{\Phi}$$

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\Phi})' = 0 \tag{A.6}$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} (\overline{\Phi})'' = 0 \tag{A.7}$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} (\check{\Phi})^* = 0 \tag{A.8}$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} (\widetilde{\Phi})^{**} = 0 \tag{A.9}$$

Mittelwert der Fluktuation

1) gemäß (3.11); 2) gemäß (3.12); 3) gemäß (3.18); 4) gemäß (3.19)

$$1) \quad \overline{(\widehat{\Phi}')} = \widehat{\Phi} - \widehat{(\Phi)}$$

$$2) \quad \overline{(\Phi'')} = \bar{\Phi} - \overline{(\Phi)}$$

$$3) \quad \overline{(\widetilde{\Phi}^*)} = \check{\Phi} - \widetilde{(\Phi)}$$

$$4) \quad \overline{(\widetilde{\Phi}^{**})} = \tilde{\Phi} - \widetilde{(\Phi)}$$

1) mit (A.2); 2) mit (A.3); 3) mit (A.4); 4) mit (A.5)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} \overline{(\widehat{\Phi}')} = \widehat{\Phi} - \widehat{\Phi}$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \overline{(\Phi'')} = \bar{\Phi} - \bar{\Phi}$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} \overline{(\widetilde{\Phi}^*)} = \check{\Phi} - \check{\Phi}$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} \overline{(\widetilde{\Phi}^{**})} = \tilde{\Phi} - \tilde{\Phi}$$

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} \overline{(\widehat{\Phi}')} = 0 \tag{A.10}$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \overline{(\Phi'')} = 0 \tag{A.11}$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} \overline{(\widetilde{\Phi}^*)} = 0 \tag{A.12}$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} \overline{(\widetilde{\Phi}^{**})} = 0 \tag{A.13}$$

Mittelwert eines Produktes, das einen Mittelwert enthält

1), 2) gemäß (3.9); 3), 4) gemäß (3.10); 5), 6) gemäß (3.16); 7), 8) gemäß (3.17)

$$1) \quad (\widehat{\Phi_1 \Phi_2}) = \frac{\int_X w b_{(X_1)} [\widehat{\Phi}_1(x) \cdot \Phi_2(x)] \cdot dx}{\int_X w b_{(X_1)} [1] \cdot dx}$$

$$2) \quad (\widetilde{\Phi_1 \Phi_2}) = \frac{\int_X w b_{(X_1)} [\widetilde{\Phi}_1(x) \cdot \Phi_2(x)] \cdot dx}{\int_X w b_{(X_1)} [1] \cdot dx}$$

$$3) \quad (\overline{\Phi_1 \Phi_2}) = \frac{\int_X T u_{(X_1)} [\overline{\Phi}_1(x) \cdot \Phi_2(x)] \cdot dx}{\int_X T u_{(X_1)} [1] \cdot dx}$$

$$4) \quad (\widetilde{\overline{\Phi_1 \Phi_2}}) = \frac{\int_X T u_{(X_1)} [\widetilde{\overline{\Phi}}_1(x) \cdot \Phi_2(x)] \cdot dx}{\int_X T u_{(X_1)} [1] \cdot dx}$$

$$5) \quad (\widetilde{\widehat{\Phi_1 \Phi_2}}) = \frac{\int_X w b_{(X_1)} [\rho(x) \cdot \widehat{\Phi}_1(x) \cdot \Phi_2(x)] \cdot dx}{\int_X w b_{(X_1)} [\rho(x)] \cdot dx}$$

$$6) \quad (\widetilde{\widetilde{\Phi_1 \Phi_2}}) = \frac{\int_X w b_{(X_1)} [\rho(x) \cdot \widetilde{\Phi}_1(x) \cdot \Phi_2(x)] \cdot dx}{\int_X w b_{(X_1)} [\rho(x)] \cdot dx}$$

$$7) \quad (\widetilde{\overline{\Phi_1 \Phi_2}}) = \frac{\int_X T u_{(X_1)} [\rho(x) \cdot \overline{\Phi}_1(x) \cdot \Phi_2(x)] \cdot dx}{\int_X T u_{(X_1)} [\rho(x)] \cdot dx}$$

$$8) \quad (\widetilde{\widetilde{\overline{\Phi_1 \Phi_2}}}) = \frac{\int_X T u_{(X_1)} [\rho(x) \cdot \widetilde{\overline{\Phi}}_1(x) \cdot \Phi_2(x)] \cdot dx}{\int_X T u_{(X_1)} [\rho(x)] \cdot dx}$$

1), 2) mit (3.13); 3), 4) mit (3.14); 5), 6) mit (3.13); 7), 8) mit (3.14)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\Phi_1 \Phi_2}) = \widehat{\Phi}_1 \frac{\int_X Wb_{(X_1)}[\Phi_2(X)] \cdot dX}{\int_X Wb_{(X_1)}[1] \cdot dX}$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} (\check{\Phi_1 \Phi_2}) = \check{\Phi}_1 \frac{\int_X Wb_{(X_1)}[\Phi_2(X)] \cdot dX}{\int_X Wb_{(X_1)}[1] \cdot dX}$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} (\overline{\Phi_1 \Phi_2}) = \overline{\Phi}_1 \frac{\int_X Tu_{(X_1)}[\Phi_2(X)] \cdot dX}{\int_X Tu_{(X_1)}[1] \cdot dX}$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} (\widetilde{\Phi_1 \Phi_2}) = \widetilde{\Phi}_1 \frac{\int_X Tu_{(X_1)}[\Phi_2(X)] \cdot dX}{\int_X Tu_{(X_1)}[1] \cdot dX}$$

$$\stackrel{5)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\Phi_1 \Phi_2}) = \widehat{\Phi}_1 \frac{\int_X Wb_{(X_1)}[\rho(X) \cdot \Phi_2(X)] \cdot dX}{\int_X Wb_{(X_1)}[\rho(X)] \cdot dX}$$

$$\stackrel{6)}{\Leftrightarrow} (\check{\Phi_1 \Phi_2}) = \check{\Phi}_1 \frac{\int_X Wb_{(X_1)}[\rho(X) \cdot \Phi_2(X)] \cdot dX}{\int_X Wb_{(X_1)}[\rho(X)] \cdot dX}$$

$$\stackrel{7)}{\Leftrightarrow} (\overline{\Phi_1 \Phi_2}) = \overline{\Phi}_1 \frac{\int_X Tu_{(X_1)}[\rho(X) \cdot \Phi_2(X)] \cdot dX}{\int_X Tu_{(X_1)}[\rho(X)] \cdot dX}$$

$$\stackrel{8)}{\Leftrightarrow} (\widetilde{\Phi_1 \Phi_2}) = \widetilde{\Phi}_1 \frac{\int_X Tu_{(X_1)}[\rho(X) \cdot \Phi_2(X)] \cdot dX}{\int_X Tu_{(X_1)}[\rho(X)] \cdot dX}$$

1), 2) mit (3.9); 3), 4) mit (3.10); 5), 6) mit (3.16); 7), 8) mit (3.17)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\Phi_1 \Phi_2}) = \widehat{\Phi_1} \widehat{\Phi_2} \quad (\text{A.14})$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} (\widetilde{\Phi_1 \Phi_2}) = \check{\Phi}_1 \widehat{\Phi}_2 \quad (\text{A.15})$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} (\overline{\Phi_1 \Phi_2}) = \overline{\Phi}_1 \overline{\Phi}_2 \quad (\text{A.16})$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} (\widetilde{\overline{\Phi_1 \Phi_2}}) = \check{\Phi}_1 \overline{\Phi}_2 \quad (\text{A.17})$$

$$\stackrel{5)}{\Leftrightarrow} (\widetilde{\widehat{\Phi_1 \Phi_2}}) = \widehat{\Phi}_1 \check{\Phi}_2 \quad (\text{A.18})$$

$$\stackrel{6)}{\Leftrightarrow} (\widetilde{\check{\Phi_1 \Phi_2}}) = \check{\Phi}_1 \check{\Phi}_2 \quad (\text{A.19})$$

$$\stackrel{7)}{\Leftrightarrow} (\widetilde{\overline{\Phi_1 \Phi_2}}) = \overline{\Phi}_1 \check{\Phi}_2 \quad (\text{A.20})$$

$$\stackrel{8)}{\Leftrightarrow} (\widetilde{\check{\Phi_1 \Phi_2}}) = \check{\Phi}_1 \check{\Phi}_2 \quad (\text{A.21})$$

Mittelwert eines Produktes von Fluktuation

1) gemäß (A.12); 2) gemäß (A.13); 3) gemäß (A.12)

$$1) \quad (\overline{\Phi_1^* \Phi_2^*}) = (\overline{\Phi_1^* \Phi_2^*}) + \check{\Phi}_1(\overline{\Phi_2^*})$$

$$2) \quad (\overline{\Phi_1^{**} \Phi_2^{**}}) = (\overline{\Phi_1^{**} \Phi_2^{**}}) + \tilde{\Phi}_1(\overline{\Phi_2^{**}})$$

$$3) \quad (\overline{\Phi_1 \Phi_2^{**}}) = (\overline{\Phi_1 \Phi_2^{**}}) + ((\overline{\Phi_1^*}) \Phi_2^{**})$$

1) mit (A.19); 2) mit (A.21); 3) mit (A.19)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} \quad (\overline{\Phi_1^* \Phi_2^*}) = (\overline{\Phi_1^* \Phi_2^*}) + (\check{\Phi}_1 \Phi_2^*)$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \quad (\overline{\Phi_1^{**} \Phi_2^{**}}) = (\overline{\Phi_1^{**} \Phi_2^{**}}) + (\tilde{\Phi}_1 \Phi_2^{**})$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} \quad (\overline{\Phi_1 \Phi_2^{**}}) = (\overline{\Phi_1 \Phi_2^{**}}) + (\overline{\Phi_1^*} \Phi_2^{**})$$

1) mit (3.18); 2) mit (3.19); 3) mit (3.18) & (A.23)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} \quad (\overline{\Phi_1^* \Phi_2^*}) = (\overline{\Phi_1 \Phi_2^*}) \tag{A.22}$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \quad (\overline{\Phi_1^{**} \Phi_2^{**}}) = (\overline{\Phi_1 \Phi_2^{**}}) \tag{A.23}$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} \quad (\overline{\Phi_1^{**} \Phi_2^{**}}) = (\overline{\Phi_1 \Phi_2^{**}}) \tag{A.24}$$

Mittelwert des Produktes einer allgemeinen Größe und der Dichte

1) gemäß (3.9); 2) gemäß (3.10)

$$1) \quad \overline{(\rho\Phi)} = \frac{\int_X Wb_{(X_1)}[\rho\Phi] \cdot dX}{\int_X Wb_{(X_1)}[1] \cdot dX}$$

$$2) \quad \overline{(\rho\Phi)} = \frac{\int_X Tu_{(X_1)}[\rho\Phi] \cdot dX}{\int_X Tu_{(X_1)}[1] \cdot dX}$$

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} \quad \overline{(\rho\Phi)} = \frac{\int_X Wb_{(X_1)}[\rho\Phi] \cdot dX}{\int_X Wb_{(X_1)}[\rho] \cdot dX} \cdot \frac{\int_X Wb_{(X_1)}[\rho] \cdot dX}{\int_X Wb_{(X_1)}[1] \cdot dX}$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \quad \overline{(\rho\Phi)} = \frac{\int_X Tu_{(X_1)}[\rho\Phi] \cdot dX}{\int_X Tu_{(X_1)}[\rho] \cdot dX} \cdot \frac{\int_X Tu_{(X_1)}[\rho] \cdot dX}{\int_X Tu_{(X_1)}[1] \cdot dX}$$

1) mit (3.9) & (3.16); 2) mit (3.10) & (3.17)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} \quad \overline{(\rho\Phi)} = \hat{\rho}\check{\Phi} \tag{A.25}$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \quad \overline{(\rho\Phi)} = \bar{\rho}\check{\Phi} \tag{A.26}$$

Fluktuationwert des Produktes einer allgemeinen Größe und der Dichte

1) gemäß (3.11) & (3.18); 2) gemäß (3.12) & (3.19)

$$1) \quad \overline{(\rho\Phi)} + (\rho\Phi)' = (\hat{\rho} + \rho')(\check{\Phi} + \Phi^*)$$

$$2) \quad \overline{(\rho\Phi)} + (\rho\Phi)'' = (\bar{\rho} + \rho'')(\tilde{\Phi} + \Phi^{**})$$

1) mit (A.25); 2) mit (A.26)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} \quad \hat{\rho}\check{\Phi} + (\rho\Phi)' = (\hat{\rho} + \rho')(\check{\Phi} + \Phi^*)$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \quad \bar{\rho}\tilde{\Phi} + (\rho\Phi)'' = (\bar{\rho} + \rho'')(\tilde{\Phi} + \Phi^{**})$$

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} \quad (\rho\Phi)' = \hat{\rho}\Phi^* + \rho'\check{\Phi} + \rho'\Phi^* \tag{A.27}$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \quad (\rho\Phi)'' = \bar{\rho}\Phi^{**} + \rho''\tilde{\Phi} + \rho''\Phi^{**} \tag{A.28}$$

Transportterme

1), 2) gemäß (3.18); 3), 4) gemäß (3.19)

$$1) \quad \rho \Phi u_j = \rho(\check{\Phi} + \Phi^*)(\check{u}_j + u_j^*)$$

$$2) \quad \rho \Phi^2 u_j = \rho(\check{\Phi} + \Phi^*)^2(\check{u}_j + u_j^*)$$

$$3) \quad \rho \Phi u_j = \rho(\tilde{\Phi} + \Phi^{**})(\tilde{u}_j + u_j^{**})$$

$$4) \quad \rho \Phi^2 u_j = \rho(\tilde{\Phi} + \Phi^{**})^2(\tilde{u}_j + u_j^{**})$$

1), 2) mit (3.11); 3), 4) mit (3.12)

$$\begin{aligned} & \rho \Phi u_j = \hat{\rho} \check{\Phi} \check{u}_j + \rho \Phi^* u_j^* + (\hat{\rho} u_j^* + \rho' \check{u}_j + \rho' u_j^*) \check{\Phi} \\ \stackrel{1)}{\Leftrightarrow} & \quad + (\hat{\rho} \Phi^* + \rho' \check{\Phi} + \rho' \Phi^*) \check{u}_j - \rho' \check{\Phi} \check{u}_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \rho \Phi^2 u_j = \hat{\rho} \check{\Phi} \check{\Phi} \check{u}_j + \rho \Phi^* \Phi^* u_j^* + \rho \Phi^* \Phi^* \check{u}_j + 2\rho \Phi^* \check{\Phi} u_j^* - 2\rho' \check{\Phi} \check{\Phi} \check{u}_j \\ \stackrel{2)}{\Leftrightarrow} & \quad + 2(\hat{\rho} \Phi^* + \rho' \check{\Phi} + \rho' \Phi^*) \check{\Phi} \check{u}_j + (\hat{\rho} u_j^* + \rho' \check{u}_j + \rho' u_j^*) \check{\Phi} \check{\Phi} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \rho \Phi u_j = \bar{\rho} \tilde{\Phi} \tilde{u}_j + \rho \Phi^{**} u_j^{**} + (\bar{\rho} u_j^{**} + \rho'' \tilde{u}_j + \rho'' u_j^{**}) \tilde{\Phi} \\ \stackrel{3)}{\Leftrightarrow} & \quad + (\bar{\rho} \Phi^{**} + \rho'' \tilde{\Phi} + \rho'' \Phi^{**}) \tilde{u}_j - \rho'' \tilde{\Phi} \tilde{u}_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \rho \Phi^2 u_j = \bar{\rho} \tilde{\Phi} \tilde{\Phi} \tilde{u}_j + \rho \Phi^{**} \Phi^{**} u_j^{**} + \rho \Phi^{**} \Phi^{**} \tilde{u}_j + 2\rho \Phi^{**} \tilde{\Phi} u_j^{**} - 2\rho'' \tilde{\Phi} \tilde{\Phi} \tilde{u}_j \\ \stackrel{4)}{\Leftrightarrow} & \quad + 2(\bar{\rho} \Phi^{**} + \rho'' \tilde{\Phi} + \rho'' \Phi^{**}) \tilde{\Phi} \tilde{u}_j + (\bar{\rho} u_j^{**} + \rho'' \tilde{u}_j + \rho'' u_j^{**}) \tilde{\Phi} \tilde{\Phi} \end{aligned}$$

1), 2) mit (A.27); 3), 4) mit (A.28)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} \rho\Phi u_j = \widehat{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + \rho\Phi^*u_j^* + (\rho u_j)'\check{\Phi} + (\rho\Phi)'\check{u}_j - \rho'\check{\Phi}\check{u}_j$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \rho\Phi^2u_j = \widehat{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + \rho\Phi^*\Phi^*u_j^* + \rho\Phi^*\Phi^*\check{u}_j + 2\rho\Phi^*\check{\Phi}u_j^* - 2\rho'\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j \\ + 2(\rho\Phi)'\check{\Phi}\check{u}_j + (\rho u_j)'\check{\Phi}\check{\Phi}$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} \rho\Phi u_j = \bar{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + \rho\Phi^{**}u_j^{**} + (\rho u_j)''\check{\Phi} + (\rho\Phi)''\check{u}_j - \rho''\check{\Phi}\check{u}_j$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} \rho\Phi^2u_j = \bar{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + \rho\Phi^{**}\Phi^{**}u_j^{**} + \rho\Phi^{**}\Phi^{**}\check{u}_j + 2\rho\Phi^{**}\check{\Phi}u_j^{**} - 2\rho''\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j \\ + 2(\rho\Phi)''\check{\Phi}\check{u}_j + (\rho u_j)''\check{\Phi}\check{\Phi}$$

Separation der Anteile der „mittleren“ Bewegung

$$\stackrel{1)}{\Rightarrow} (\widehat{\rho\Phi u_j}) = (\widehat{\rho\check{\Phi}\check{u}_j}) + (\widehat{\rho\Phi^*u_j^*}) + ((\widehat{\rho u_j})'\check{\Phi}) + ((\widehat{\rho\Phi})'\check{u}_j) - (\widehat{\rho'\check{\Phi}\check{u}_j})$$

$$\stackrel{2)}{\Rightarrow} (\widehat{\rho\Phi^2u_j}) = (\widehat{\rho\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j}) + (\widehat{\rho\Phi^*\Phi^*u_j^*}) + (\widehat{\rho\Phi^*\Phi^*\check{u}_j}) + 2(\widehat{\rho\Phi^*\check{\Phi}u_j^*}) \\ - 2(\widehat{\rho'\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j}) + 2((\widehat{\rho\Phi})'\check{\Phi}\check{u}_j) + ((\widehat{\rho u_j})'\check{\Phi}\check{\Phi})$$

$$\stackrel{3)}{\Rightarrow} (\overline{\rho\Phi u_j}) = (\overline{\rho\check{\Phi}\check{u}_j}) + (\overline{\rho\Phi^{**}u_j^{**}}) + ((\overline{\rho u_j})''\check{\Phi}) + ((\overline{\rho\Phi})''\check{u}_j) - (\overline{\rho''\check{\Phi}\check{u}_j})$$

$$\stackrel{4)}{\Rightarrow} (\overline{\rho\Phi^2u_j}) = (\overline{\rho\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j}) + (\overline{\rho\Phi^{**}\Phi^{**}u_j^{**}}) + (\overline{\rho\Phi^{**}\Phi^{**}\check{u}_j}) + 2(\overline{\rho\Phi^{**}\check{\Phi}u_j^{**}}) \\ - 2(\overline{\rho''\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j}) + 2((\overline{\rho\Phi})''\check{\Phi}\check{u}_j) + ((\overline{\rho u_j})''\check{\Phi}\check{\Phi})$$

1), 2) mit (A.14) & (A.15); 3), 4) mit (A.16) & (A.17)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\rho\Phi u_j}) = \widehat{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + (\widehat{\rho\Phi^*u_j^*}) + \check{\Phi}((\widehat{\rho u_j})') + \check{u}_j((\widehat{\rho\Phi})') - \check{\Phi}\check{u}_j(\widehat{\rho'})$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\rho\Phi^2u_j}) = \widehat{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + (\widehat{\rho\Phi^*\Phi^*u_j^*}) + (\widehat{\rho\Phi^*\Phi^*})\check{u}_j + 2(\widehat{\rho\Phi^*u_j^*})\check{\Phi} \\ - 2(\widehat{\rho'})\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + 2((\widehat{\rho\Phi})')\check{\Phi}\check{u}_j + ((\widehat{\rho u_j})')\check{\Phi}\check{\Phi}$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} (\overline{\rho\Phi u_j}) = \overline{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + (\overline{\rho\Phi^{**}u_j^{**}}) + \check{\Phi}(\overline{(\rho u_j)'')}) + \check{u}_j(\overline{(\rho\Phi)'}) - \check{\Phi}\check{u}_j(\overline{\rho''})$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} (\overline{\rho\Phi^2u_j}) = \overline{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + (\overline{\rho\Phi^{**}\Phi^{**}u_j^{**}}) + (\overline{\rho\Phi^{**}\Phi^{**}})\check{u}_j + 2(\overline{\rho\Phi^{**}u_j^{**}})\check{\Phi} \\ - 2(\overline{\rho''})\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + 2(\overline{(\rho\Phi)'})\check{\Phi}\check{u}_j + (\overline{(\rho u_j)'')})\check{\Phi}\check{\Phi}$$

1), 2) mit (A.10); 3), 4) mit (A.11)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\rho\Phi u_j}) = \widehat{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + (\widehat{\rho\Phi^*u_j^*})$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\rho\Phi^2u_j}) = \widehat{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + (\widehat{\rho\Phi^*\Phi^*u_j^*}) + (\widehat{\rho\Phi^*\Phi^*})\check{u}_j + 2(\widehat{\rho\Phi^*u_j^*})\check{\Phi}$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} (\overline{\rho\Phi u_j}) = \overline{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + (\overline{\rho\Phi^{**}u_j^{**}})$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} (\overline{\rho\Phi^2u_j}) = \overline{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + (\overline{\rho\Phi^{**}\Phi^{**}u_j^{**}}) + (\overline{\rho\Phi^{**}\Phi^{**}})\check{u}_j + 2(\overline{\rho\Phi^{**}u_j^{**}})\check{\Phi}$$

1), 2) mit (A.25); 3), 4) mit (A.26)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\rho\Phi u_j}) = \widehat{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + \widehat{\rho}(\widehat{\Phi^*u_j^*}) \quad (\text{A.29})$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \frac{1}{2}(\widehat{\rho\Phi^2 u_j}) = \frac{1}{2}\widehat{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + \frac{1}{2}\widehat{\rho}(\widehat{\Phi^*\Phi^*u_j^*}) + \frac{1}{2}\widehat{\rho}(\widehat{\Phi^*\Phi^*})\check{u}_j + \widehat{\rho}(\widehat{\Phi^*u_j^*})\check{\Phi}$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} (\overline{\rho\Phi u_j}) = \overline{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + \overline{\rho}(\widehat{\Phi^{**}u_j^{**}}) \quad (\text{A.30})$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} \frac{1}{2}(\overline{\rho\Phi^2 u_j}) = \frac{1}{2}\overline{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + \frac{1}{2}\overline{\rho}(\widehat{\Phi^{**}\Phi^{**}u_j^{**}}) + \frac{1}{2}\overline{\rho}(\widehat{\Phi^{**}\Phi^{**}})\check{u}_j + \overline{\rho}(\widehat{\Phi^{**}u_j^{**}})\check{\Phi}$$

1), 2) mit (A.22); 3), 4) mit (A.24)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} (\widehat{\rho\Phi u_j}) = \widehat{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + \widehat{\rho}(\widehat{\Phi u_j^*}) \quad (\text{A.31})$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \frac{1}{2}(\widehat{\rho\Phi^2 u_j}) = \frac{1}{2}\widehat{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + \frac{1}{2}\widehat{\rho}(\widehat{\Phi^*\Phi^*u_j^*}) + \frac{1}{2}\widehat{\rho}(\widehat{\Phi^*\Phi^*})\check{u}_j + \widehat{\rho}(\widehat{\Phi u_j^*})\check{\Phi} \quad (\text{A.32})$$

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} (\overline{\rho\Phi u_j}) = \overline{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + \overline{\rho}(\widehat{(\Phi u_j^{**})})$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} \frac{1}{2}(\overline{\rho\Phi^2 u_j}) = \frac{1}{2}\overline{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + \frac{1}{2}\overline{\rho}(\widehat{\Phi^{**}\Phi^{**}u_j^{**}}) + \frac{1}{2}\overline{\rho}(\widehat{\Phi^{**}\Phi^{**}})\check{u}_j + \overline{\rho}(\widehat{(\Phi u_j^{**})})\check{\Phi}$$

3), 4) mit (A.26)

$$\stackrel{3)}{\Leftrightarrow} (\overline{\rho\Phi u_j}) = \overline{\rho}\check{\Phi}\check{u}_j + (\overline{\rho(\widehat{\Phi u_j^{**}})}) \quad (\text{A.33})$$

$$\stackrel{4)}{\Leftrightarrow} \frac{1}{2}(\overline{\rho\Phi^2 u_j}) = \frac{1}{2}\overline{\rho}\check{\Phi}\check{\Phi}\check{u}_j + \frac{1}{2}\overline{\rho}(\widehat{\Phi^{**}\Phi^{**}u_j^{**}}) + \frac{1}{2}\overline{\rho}(\widehat{\Phi^{**}\Phi^{**}})\check{u}_j + (\overline{\rho(\widehat{\Phi u_j^{**}})})\check{\Phi} \quad (\text{A.34})$$

A.2 Umformung der Bilanzgleichungen

Bilanzgleichung der Masse eines Bestandteils b

(3.1) mit (A.1)

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_{Ph} x_{Ph,b}] \cdot dV + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho_{Ph} x_{Ph,b} u_{Ph,j}] \cdot dV = S_{M,b} \cdot dV$$

Separation der Anteile der Molarbewegung

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} [(\widehat{\rho_{Ph} x_{Ph,b}})] + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\widehat{\rho_{Ph} x_{Ph,b} u_{Ph,j}})] = \widehat{S}_{M,b}$$

mit (A.25) & (A.31)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} [\widehat{\rho_{Ph} \tilde{x}_{Ph,b}}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\widehat{\rho_{Ph} \tilde{x}_{Ph,b} \tilde{u}_{Ph,j}} + \widehat{\rho_{Ph} (x_{Ph,b} \widetilde{u_{Ph,j}^*})}] = \widehat{S}_{M,b}$$

mit Tabelle 3.3 & Tabelle 3.4

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} [\rho_{Ph} x_{Ph,b}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho_{Ph} x_{Ph,b} u_{Ph,j} + \rho_{Ph} (x_{Ph,b} \widetilde{u_{Ph,j}^*})] = S_{M,b}$$

Separation der Anteile der Strömungsbewegung

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} [(\overline{\rho_{Ph} x_{Ph,b}})] + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\overline{\rho_{Ph} x_{Ph,b} u_{Ph,j}}) + (\overline{\rho_{Ph} (x_{Ph,b} \widetilde{u_{Ph,j}^*})})] = \bar{S}_{M,b}$$

mit (3.15) & (A.33)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{x}_{Ph,b} \tilde{u}_{Ph,j} + (\overline{\rho_{Ph} (x_{Ph,b} \widetilde{u_{Ph,j}^{**}})}) + (\overline{\rho_{Ph} (x_{Ph,b} \widetilde{u_{Ph,j}^*})})] = \bar{S}_{M,b}$$

mit Tabelle 3.6 & Tabelle 3.7

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{x}_{Ph,b} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{j}_{Ph,b,j}^{Tu} + \bar{j}_{Ph,b,j}^{Wb}] = \bar{S}_{M,b} \quad (3.20)$$

Bilanzgleichung der gesamten Masse

(3.1) summiert über alle Bestandteile einer Phase

$$\frac{d}{dt} [\rho_{Ph} \cdot dV] = \sum_{Ph} [S_{M,b}] \cdot dV$$

mit (A.1)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} [\rho_{Ph}] \cdot dV + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}] \cdot dV = \sum_{Ph} [S_{M,b}] \cdot dV$$

Separation der Anteile der Molarbewegung

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} [\widehat{\rho}_{Ph}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\widehat{\rho}_{Ph} \widehat{\mathbf{u}}_{Ph,j})] = \sum_{Ph} [\widehat{S}_{M,b}]$$

mit (A.25)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} [\widehat{\rho}_{Ph}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\widehat{\rho}_{Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,j}] = \sum_{Ph} [\widehat{S}_{M,b}]$$

mit Tabelle 3.3 & Tabelle 3.4

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} [\rho_{Ph}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho_{Ph} u_{Ph,j}] = \sum_{Ph} [S_{M,b}] \quad (\text{A.35})$$

Separation der Anteile der Strömungsbewegung

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho}_{Ph}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\overline{\rho_{Ph} u_{Ph,j}})] = \sum_{Ph} [\bar{S}_{M,b}]$$

mit (3.15) & (A.26)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,j}] = \sum_{Ph} [\bar{S}_{M,b}] \quad (\text{A.36})$$

Bilanzgleichung des Impulses in Richtung i

(3.2) mit (A.1)

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i}] \cdot dV + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,j}] \cdot dV = [g_i + f_{Ph,i}] \rho_{Ph} \cdot dV$$

Separation der Anteile der Molarbewegung

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} [(\widehat{\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i}})] + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\widehat{\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,j}})] = g_i \widehat{\rho_{Ph}} + (\widehat{f_{Ph,i} \rho_{Ph}})$$

mit (A.25) & (A.31)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} [\widehat{\rho_{Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,i}}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\widehat{\rho_{Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,i} \check{\mathbf{u}}_{Ph,j}} + \widehat{\rho_{Ph} (\mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,j}^*)}] = g_i \widehat{\rho_{Ph}} + \check{f}_{Ph,i} \widehat{\rho_{Ph}}$$

mit Tabelle 3.3 & Tabelle 3.4

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} [\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,j} + \rho_{Ph} (\mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,j}^*)] = g_i \rho_{Ph} + f_{Ph,i} \rho_{Ph} \quad (\text{A.37})$$

Separation der Anteile der Strömungsbewegung

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} [(\overline{\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i}})] + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\overline{\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,j}}) + (\overline{\rho_{Ph} (\mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,j}^*)})] = g_i \bar{\rho}_{Ph} + (\overline{f_{Ph,i} \rho_{Ph}})$$

mit (3.15), (A.26) & (A.33)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,i} \check{\mathbf{u}}_{Ph,j} + (\overline{\rho_{Ph} (\mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,j}^*)}) + (\overline{\rho_{Ph} (\mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,j}^*)})] = g_i \bar{\rho}_{Ph} + \check{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph}$$

mit Tabelle 3.6 & Tabelle 3.7

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,i} \check{\mathbf{u}}_{Ph,j} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb}] = g_i \bar{\rho}_{Ph} + \check{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph} \quad (3.21)$$

Bilanzgleichung der gesamten Bewegungsenergie

(3.3) mit (A.1)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_{Ph} \left(\mathbf{e}_{iB,Ph} + \mathbf{e}_{chem,Ph} + \frac{1}{2} \mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,i} \right) \right] \cdot dV \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho_{Ph} \left(\mathbf{e}_{iB,Ph} + \mathbf{e}_{chem,Ph} + \frac{1}{2} \mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,i} \right) \mathbf{u}_{Ph,j} \right] \cdot dV \\ & = [g_i + \mathbf{f}_{Ph,i}] \rho_{Ph} \cdot dV \cdot \frac{dx_i}{dt} + \mathbf{S}_{Str,Ph} \cdot dV \end{aligned}$$

Separation der Anteile der Molarbewegung

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\widehat{\rho_{Ph} \mathbf{e}_{iB,Ph}} \right) + \left(\widehat{\rho_{Ph} \mathbf{e}_{chem,Ph}} \right) + \frac{1}{2} \left(\widehat{\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,i}} \right) \right] \\ \Rightarrow & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\widehat{\rho_{Ph} \mathbf{e}_{iB,Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}} \right) + \left(\widehat{\rho_{Ph} \mathbf{e}_{chem,Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}} \right) + \frac{1}{2} \left(\widehat{\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,j}} \right) \right] \\ & = g_i \left(\widehat{\rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i}} \right) + \left(\widehat{\mathbf{f}_{Ph,i} \rho_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,i}} \right) + \widehat{\mathbf{S}}_{Str,Ph} \end{aligned}$$

mit (A.25), (A.29), (A.31) & (A.32)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\widehat{\rho_{Ph} \check{\mathbf{e}}_{iB,Ph}} + \widehat{\rho_{Ph} \check{\mathbf{e}}_{chem,Ph}} + \frac{1}{2} \widehat{\rho_{Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,i} \check{\mathbf{u}}_{Ph,i}} + \frac{1}{2} \widehat{\rho_{Ph} (\mathbf{u}_{Ph,i}^* \mathbf{u}_{Ph,i}^*)} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\widehat{\rho_{Ph} \check{\mathbf{e}}_{iB,Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,j}} + \widehat{\rho_{Ph} (\mathbf{e}_{iB,Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}^*)} + \widehat{\rho_{Ph} \check{\mathbf{e}}_{chem,Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,j}} \right. \\ \Leftrightarrow & + \widehat{\rho_{Ph} (\mathbf{e}_{chem,Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}^*)} + \frac{1}{2} \widehat{\rho_{Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,i} \check{\mathbf{u}}_{Ph,i} \check{\mathbf{u}}_{Ph,j}} + \frac{1}{2} \widehat{\rho_{Ph} (\mathbf{u}_{Ph,i}^* \mathbf{u}_{Ph,i}^* \mathbf{u}_{Ph,j}^*)} \\ & + \left. \frac{1}{2} \widehat{\rho_{Ph} (\mathbf{u}_{Ph,i}^* \mathbf{u}_{Ph,i}^*) \check{\mathbf{u}}_{Ph,j}} + \widehat{\rho_{Ph} (\mathbf{u}_{Ph,i} \mathbf{u}_{Ph,i}^*) \check{\mathbf{u}}_{Ph,i}} \right] \\ & = g_i \widehat{\rho_{Ph} \check{\mathbf{u}}_{Ph,i}} + \widehat{\rho_{Ph} \check{\mathbf{f}}_{Ph,i} \check{\mathbf{u}}_{Ph,i}} + \widehat{\rho_{Ph} (\mathbf{f}_{Ph,i}^* \mathbf{u}_{Ph,i}^*)} + \widehat{\mathbf{S}}_{Str,Ph} \end{aligned}$$

mit Tabelle 3.5

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[\widehat{\rho}_{Ph} \widetilde{U}_{Ph} + \frac{1}{2} \widehat{\rho}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\widehat{\rho}_{Ph} \widetilde{U}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,j} + \widehat{\rho}_{Ph} (\widetilde{U}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,j}^*) \right] \\
\Leftrightarrow & \quad + \frac{1}{2} \widehat{\rho}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,j} + \widehat{\rho}_{Ph} (\widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,j}^*) \widetilde{u}_{Ph,i} \Big] \\
& = g_i \widehat{\rho}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,i} + \widehat{\rho}_{Ph} \widetilde{f}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,i} + \widehat{\rho}_{Ph} (\widetilde{f}_{Ph,i}^* \widetilde{u}_{Ph,i}^*) + \widehat{S}_{Str,Ph}
\end{aligned}$$

mit Tabelle 3.3 & Tabelle 3.4

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_{Ph} U_{Ph} + \frac{1}{2} \rho_{Ph} u_{Ph,i} u_{Ph,i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho_{Ph} U_{Ph} u_{Ph,j} + \rho_{Ph} (\widetilde{U}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,j}^*) \right] \\
\Leftrightarrow & \quad + \frac{1}{2} \rho_{Ph} u_{Ph,i} u_{Ph,i} u_{Ph,j} + \rho_{Ph} (\widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,j}^*) u_{Ph,i} \Big] \\
& = g_i \rho_{Ph} u_{Ph,i} + \rho_{Ph} f_{Ph,i} u_{Ph,i} + \rho_{Ph} (\widetilde{f}_{Ph,i}^* \widetilde{u}_{Ph,i}^*) + S_{Str,Ph}
\end{aligned}$$

Separation der Anteile der Strömungsbewegung

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[\overline{(\rho_{Ph} U_{Ph})} + \frac{1}{2} \overline{(\rho_{Ph} u_{Ph,i} u_{Ph,i})} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{(\rho_{Ph} U_{Ph} u_{Ph,j})} \right] \\
\Rightarrow & \quad + \left[\overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{U}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,j}^*))} \right] + \frac{1}{2} \overline{(\rho_{Ph} u_{Ph,i} u_{Ph,i} u_{Ph,j})} + \overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,j}^*) u_{Ph,i})} \Big] \\
& = g_i \overline{(\rho_{Ph} u_{Ph,i})} + \overline{(\rho_{Ph} f_{Ph,i} u_{Ph,i})} + \overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{f}_{Ph,i}^* \widetilde{u}_{Ph,i}^*))} + \overline{S}_{Str,Ph}
\end{aligned}$$

mit (3.15), (3.19), (A.26), (A.30), (A.33) & (A.34)

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \widetilde{U}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,j} + \overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{U}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,j}^{**}))} + \overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{U}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,j}^*))} \right] \\
& \quad + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,j} + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{u}_{Ph,i}^{**} \widetilde{u}_{Ph,i}^{**} \widetilde{u}_{Ph,j}^*) + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{u}_{Ph,i}^{**} \widetilde{u}_{Ph,i}^{**}) \widetilde{u}_{Ph,j} \\
\Leftrightarrow & \quad + \overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,j}^{**}))} \widetilde{u}_{Ph,i} + \overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,j}^*))} \widetilde{u}_{Ph,i} \\
& \quad + \overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{u}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,j}^*) u_{Ph,i}^{**})} \Big] = g_i \bar{\rho}_{Ph} \widetilde{u}_{Ph,i} \\
& \quad + \bar{\rho}_{Ph} \widetilde{f}_{Ph,i} \widetilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{f}_{Ph,i}^{**} \widetilde{u}_{Ph,i}^{**}) + \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{f}_{Ph,i}^* \widetilde{u}_{Ph,i}^*) + \overline{S}_{Str,Ph}
\end{aligned}$$

mit (A.17)

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \tilde{U}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j} + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{U}_{Ph} \widetilde{u_{Ph,j}^{**}}))} + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{U}_{Ph} \widetilde{\mathbf{u}_{Ph,j}^*}))} \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} (u_{Ph,i}^{**} \widetilde{u_{Ph,i}^{**}} u_{Ph,j}^{**}) + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} (u_{Ph,i}^{**} \widetilde{u_{Ph,i}^{**}}) \tilde{u}_{Ph,j} \right. \\
\Leftrightarrow & \quad \left. + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{u}_{Ph,i} \widetilde{u_{Ph,j}^{**}}))} \tilde{u}_{Ph,i} + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{u}_{Ph,i} \widetilde{\mathbf{u}_{Ph,j}^*}))} \tilde{u}_{Ph,i} \right. \\
& \quad \left. + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{u}_{Ph,i} \widetilde{\mathbf{u}_{Ph,j}^*}) u_{Ph,i}^{**})} \right] = g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \\
& \quad + \bar{\rho}_{Ph} \tilde{f}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} (f_{Ph,i}^{**} \widetilde{u_{Ph,i}^{**}}) + \bar{\rho}_{Ph} ((\mathbf{f}_{Ph,i}^* \widetilde{\mathbf{u}_{Ph,i}^*})) + \bar{S}_{Str,Ph}
\end{aligned}$$

mit Tabelle 3.5 & Tabelle 3.6

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \left(\tilde{U}_{Ph} + \frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} + \tilde{k}_{Ph} \right) \tilde{u}_{Ph,j} + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{U}_{Ph} \widetilde{u_{Ph,j}^{**}}))} \right. \\
& \quad \left. + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{U}_{Ph} \widetilde{\mathbf{u}_{Ph,j}^*}))} + \bar{\rho}_{Ph} (k_{Ph} \widetilde{u_{Ph,j}^{**}}) + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb} \tilde{u}_{Ph,i} \right. \\
\Leftrightarrow & \quad \left. + \overline{(\sigma_{Ph,i,j}^{Wb} u_{Ph,i}^{**})} \right] = g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tag{A.38} \\
& \quad + \bar{\rho}_{Ph} \tilde{f}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} (f_{Ph,i}^{**} \widetilde{u_{Ph,i}^{**}}) + \bar{\rho}_{Ph} ((\mathbf{f}_{Ph,i}^* \widetilde{\mathbf{u}_{Ph,i}^*})) + \bar{S}_{Str,Ph}
\end{aligned}$$

Bilanzgleichung der kinetischen Energie

$$\tilde{u}_{Ph,i} \cdot (3.21) - \frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \cdot (A.36)$$

$$\tilde{u}_{Ph,i} \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb}] - \frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j}]$$

$$\Leftrightarrow$$

$$= g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} + \tilde{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} - \frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \sum_{Ph} [\bar{S}_{M,b}]$$

$$+ \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j}] + \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} \frac{\partial}{\partial x_j} [\tilde{u}_{Ph,i}]$$

$$\Leftrightarrow$$

$$+ \tilde{u}_{Ph,i} \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb}] - \frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j}]$$

$$= g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} + \tilde{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} - \frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \sum_{Ph} [\bar{S}_{M,b}]$$

$$\frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j}] + \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \right]$$

$$\Leftrightarrow$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x_j} [\tilde{u}_{Ph,i} (\bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb})] - (\bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb}) \frac{\partial}{\partial x_j} [\tilde{u}_{Ph,i}]$$

$$= g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} + \tilde{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} - \frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \sum_{Ph} [\bar{S}_{M,b}]$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\tilde{u}_{Ph,i} (\bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb})]$$

$$\Leftrightarrow$$

$$- (\bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb}) \frac{\partial}{\partial x_j} [\tilde{u}_{Ph,i}]$$

$$= g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} + \tilde{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} - \frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \sum_{Ph} [\bar{S}_{M,b}]$$

mit Tabelle 3.6 & Tabelle 3.7

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} + \tilde{u}_{Ph,i} \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \tilde{u}_{Ph,i} \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb} \right]$$

$$\Leftrightarrow$$

$$= -G_{Ph}^{Bew} - G_{Ph}^{Umw} - \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Sb} + g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} + \tilde{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i}$$

(3.22)

Bilanzgleichung der Turbulenzenergie

$$\begin{aligned}
 & \underline{u_{Ph,i} \cdot (A.37) - \frac{1}{2} u_{Ph,i} u_{Ph,i} \cdot (A.35)} \\
 & u_{Ph,i} \frac{\partial}{\partial t} [\rho_{Ph} u_{Ph,i}] - \frac{1}{2} u_{Ph,i} u_{Ph,i} \frac{\partial}{\partial t} [\rho_{Ph}] \\
 \Leftrightarrow & + u_{Ph,i} \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho_{Ph} u_{Ph,i} u_{Ph,j} + \rho_{Ph} (\overline{u_{Ph,i} u_{Ph,j}^*})] - \frac{1}{2} u_{Ph,i} u_{Ph,i} \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho_{Ph} u_{Ph,j}] \\
 & = g_i \rho_{Ph} u_{Ph,i} + f_{Ph,i} \rho_{Ph} u_{Ph,i} - \frac{1}{2} u_{Ph,i} u_{Ph,i} \Sigma_{Ph} [S_{M,b}] \\
 \hline
 & \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{2} \rho_{Ph} u_{Ph,i} u_{Ph,i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \rho_{Ph} u_{Ph,i} u_{Ph,i} u_{Ph,j} \right] \\
 \Leftrightarrow & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho_{Ph} (\overline{u_{Ph,i} u_{Ph,j}^*}) u_{Ph,i} \right] - \rho_{Ph} (\overline{u_{Ph,i} u_{Ph,j}^*}) \frac{\partial}{\partial x_j} [u_{Ph,i}] \\
 & = g_i \rho_{Ph} u_{Ph,i} + f_{Ph,i} \rho_{Ph} u_{Ph,i} - \frac{1}{2} u_{Ph,i} u_{Ph,i} \Sigma_{Ph} [S_{M,b}] \\
 \hline
 \end{aligned}$$

Separation der Anteile der Strömungsbewegung

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{2} \overline{(\rho_{Ph} u_{Ph,i} u_{Ph,i})} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \overline{(\rho_{Ph} u_{Ph,i} u_{Ph,i} u_{Ph,j})} \right] \\
 \Rightarrow & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{(\rho_{Ph} (\overline{u_{Ph,i} u_{Ph,j}^*}) u_{Ph,i})} \right] - \overline{(\rho_{Ph} (\overline{u_{Ph,i} u_{Ph,j}^*}) \frac{\partial}{\partial x_j} [u_{Ph,i}])} \\
 & = g_i \overline{(\rho_{Ph} u_{Ph,i})} + \overline{(f_{Ph,i} \rho_{Ph} u_{Ph,i})} - \frac{1}{2} \overline{(u_{Ph,i} u_{Ph,i} \Sigma_{Ph} [S_{M,b}])} \\
 \hline
 \end{aligned}$$

mit (3.15), (3.19), (A.26), (A.30) & (A.34)

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} (u_{Ph,i}^{**} \overline{u_{Ph,i}^{**} u_{Ph,j}^{**}}) \right] \\
 & + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} (\overline{u_{Ph,i}^{**} u_{Ph,i}^{**}}) \tilde{u}_{Ph,j} + \overline{(\rho_{Ph} (\overline{u_{Ph,i} u_{Ph,j}^*}))} \tilde{u}_{Ph,i} \\
 \Leftrightarrow & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{(\rho_{Ph} (\overline{u_{Ph,i} u_{Ph,j}^*}) \tilde{u}_{Ph,i})} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{(\rho_{Ph} (\overline{u_{Ph,i} u_{Ph,j}^*}) u_{Ph,i}^{**})} \right] \\
 & - \overline{(\rho_{Ph} (\overline{u_{Ph,i} u_{Ph,j}^*}) \frac{\partial}{\partial x_j} [\tilde{u}_{Ph,i}])} - \overline{(\rho_{Ph} (\overline{u_{Ph,i} u_{Ph,j}^*}) \frac{\partial}{\partial x_j} [u_{Ph,i}^{**}])} \\
 & = g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} \tilde{f}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} (\overline{f_{Ph,i}^{**} u_{Ph,i}^{**}}) - \frac{1}{2} \overline{(u_{Ph,i} u_{Ph,i} \Sigma_{Ph} [S_{M,b}])} \\
 \hline
 \end{aligned}$$

mit (A.17)

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{u_{Ph,i}^{**} u_{Ph,i}^{**} u_{Ph,j}^{**}}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{u_{Ph,i}^{**} u_{Ph,i}^{**}}) \tilde{u}_{Ph,j} + \overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{u_{Ph,i}^{**} u_{Ph,j}^{**}}))} \tilde{u}_{Ph,i} \right] \\
\Leftrightarrow & \quad + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{u_{Ph,i}^{**} u_{Ph,j}^{**}}))} \tilde{u}_{Ph,i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{u_{Ph,i}^{**} u_{Ph,j}^{**}}) u_{Ph,i}^{**})} \right] \\
& \quad - \overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{u_{Ph,i}^{**} u_{Ph,j}^{**}}))} \frac{\partial}{\partial x_j} [\tilde{u}_{Ph,i}] - \overline{(\rho_{Ph} (\widetilde{u_{Ph,i}^{**} u_{Ph,j}^{**}}) \frac{\partial}{\partial x_j} [u_{Ph,i}^{**}])} \\
& \quad = g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} \tilde{f}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{f_{Ph,i}^{**} u_{Ph,i}^{**}}) - \frac{1}{2} \overline{(u_{Ph,i} u_{Ph,i} \Sigma_{Ph} [S_{M,b}])}
\end{aligned}$$

mit Tabelle 3.5, Tabelle 3.6 & Tabelle 3.7

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{k_{Ph} u_{Ph,j}^{**}}) + \bar{\rho}_{Ph} \tilde{k}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} \tilde{u}_{Ph,i} \right] \\
\Leftrightarrow & \quad + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb} \tilde{u}_{Ph,i}] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{(\sigma_{Ph,i,j}^{Wb} u_{Ph,i}^{**})} \right] + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Sb} + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Tu} \\
& \quad = g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} \tilde{f}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{f_{Ph,i}^{**} u_{Ph,i}^{**}}) - \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Umw}
\end{aligned}$$

(3.22) subtrahiert

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \tilde{k}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{k_{Ph} u_{Ph,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{Ph,i,j}^{Wb} u_{Ph,i}^{**})} \right] \\
\Leftrightarrow & \quad = G_{Ph}^{Bew} + G_{Ph}^{Umw} - \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Tu} - \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Umw} + \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{f_{Ph,i}^{**} u_{Ph,i}^{**}})
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Bilanzgleichung der inneren Energie

(A.38) – (3.22) – (3.23)

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \left(\tilde{U}_{Ph} + \frac{1}{2} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} + \tilde{k}_{Ph} \right) \tilde{u}_{Ph,j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} \right] \\
& - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \tilde{k}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{U}_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}^{**}))} + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{U}_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}^*))} \right] \\
& + \bar{\rho}_{Ph} \left(\overline{k_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}^{**}} \right) + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb} \tilde{u}_{Ph,i} + \overline{(\sigma_{Ph,i,j}^{Wb} \mathbf{u}_{Ph,i}^{**})} \\
\Leftrightarrow & - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{u}_{Ph,i} (\bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb}) \right] - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \left(\overline{k_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}^{**}} \right) + \overline{(\sigma_{Ph,i,j}^{Wb} \mathbf{u}_{Ph,i}^{**})} \right] \\
& = g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} \tilde{f}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,i} + \bar{\rho}_{Ph} \left(\overline{f_{Ph,i}^{**} \mathbf{u}_{Ph,i}^{**}} \right) + \bar{\rho}_{Ph} \left(\overline{(\mathbf{f}_{Ph,i}^* \mathbf{u}_{Ph,i}^*)} \right) \\
& + \bar{S}_{Str,Ph} + G_{Ph}^{Bew} + G_{Ph}^{Umw} + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Sb} - g_i \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} - \tilde{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \\
& - G_{Ph}^{Bew} - G_{Ph}^{Umw} + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Tu} + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Umw} - \bar{\rho}_{Ph} \left(\overline{f_{Ph,i}^{**} \mathbf{u}_{Ph,i}^{**}} \right) \\
\hline
& \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \tilde{U}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j} + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{U}_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}^{**}))} + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{U}_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}^*))} \right] \\
\Leftrightarrow & = \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Sb} + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Tu} + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Umw} + \bar{S}_{Str,Ph} + \bar{\rho}_{Ph} \left(\overline{(\mathbf{f}_{Ph,i}^* \mathbf{u}_{Ph,i}^*)} \right)
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Bilanzgleichung der spektralen Strahlungsdichte

$$\frac{d}{dx} L_{\lambda,x} = \frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{ems} + \frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{abs} + \frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{rfl} \quad (3.4)$$

Separation der Anteile der Molarbewegung

$$\Rightarrow \frac{d}{dx} \hat{L}_{\lambda,x} = \frac{d}{dx} \hat{L}_{\lambda,x} \Big|_{ems} + \frac{d}{dx} \hat{L}_{\lambda,x} \Big|_{abs} + \frac{d}{dx} \hat{L}_{\lambda,x} \Big|_{rfl}$$

mit Tabelle 3.3

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dx} L_{\lambda,x} = \frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{ems} + \frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{abs} + \frac{d}{dx} L_{\lambda,x} \Big|_{rfl}$$

Separation der Anteile der Strömungsbewegung

$$\Rightarrow \frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} = \frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} \Big|_{ems} + \frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} \Big|_{abs} + \frac{d}{dx} \bar{L}_{\lambda,x} \Big|_{rfl} \quad (3.25)$$

B Vereinfachung der Bilanzgleichungen der exakten Strömungsbewegung

B.1 Folgerungen einer Vereinfachung der Partikelbewegung

Die Bewegung von Partikeln ist durch eine vereinfachte Bewegung abstrahiert, wie durch die Gleichungen (3.26) bis (3.29) zum Ausdruck gebracht ist. Aus diesen Gleichungen und den in Anhang A aufgeführten Umformungen gehen die nachstehenden Folgerungen hervor.

$$\tilde{u}_{P,j} = \tilde{u}_{G,j} \quad (\text{B.1})$$

$$\tilde{k}_P = \tilde{k}_G \quad (\text{B.2})$$

$$\bar{J}_{P,b,j}^{Wb} = 0 \quad (\text{B.3})$$

$$\bar{\sigma}_{P,i,j}^{Wb} = 0 \quad (\text{B.4})$$

$$\bar{\sigma}_{P,i,j}^{Tu} = \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} \quad (\text{B.5})$$

$$(\widetilde{k_P u_{P,j}^{**}}) = (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) \quad (\text{B.6})$$

$$\varepsilon_P^{Tu} = 0 \quad (\text{B.7})$$

$$G_P^{Bew} = \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} G_G^{Bew} \quad (\text{B.8})$$

$$G_P^{Umw} = -G_G^{Umw} \quad (\text{B.9})$$

$$\bar{\rho}_G (\widetilde{f_{G,i}^{**} u_{G,i}^{**}}) + \bar{\rho}_P (\widetilde{f_{P,i}^{**} u_{P,i}^{**}}) = 0 \quad (\text{B.10})$$

B.2 Umformung der Bilanzgleichungen

Bilanzgleichung der Masse eines Bestandteils b

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{x}_{Ph,b} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{J}_{Ph,b,j}^{Tu} + \bar{J}_{Ph,b,j}^{Wb}] = \bar{S}_{M,b} \quad (3.20)$$

Formulierung für 1) Gasphase und 2) Partikelphase

$$1) \quad \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_G \tilde{x}_{G,b} \tilde{u}_{G,j} + \bar{J}_{G,b,j}^{Tu} + \bar{J}_{G,b,j}^{Wb}] = \bar{S}_{M,b}$$

$$2) \quad \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_P \tilde{x}_{P,b} \tilde{u}_{P,j} + \bar{J}_{P,b,j}^{Tu} + \bar{J}_{P,b,j}^{Wb}] = \bar{S}_{M,b}$$

2) mit (B.1) & (B.3)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_G \tilde{x}_{G,b} \tilde{u}_{G,j} + \bar{J}_{G,b,j}^{Tu} + \bar{J}_{G,b,j}^{Wb}] = \bar{S}_{M,b}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_P \tilde{x}_{P,b} \tilde{u}_{G,j} + \bar{J}_{P,b,j}^{Tu}] = \bar{S}_{M,b}$$

mit Tabelle 3.8

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{x}_b \tilde{u}_j + \bar{J}_{G,b,j}^{Tu} + \bar{J}_{G,b,j}^{Wb}] = \bar{S}_{M,b} \quad (3.35)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{x}_b \tilde{u}_j + \bar{J}_{P,b,j}^{Tu}] = \bar{S}_{M,b} \quad (3.36)$$

Bilanzgleichung der gesamten Masse

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j}] = \sum_{Ph} [\bar{S}_{M,b}] \quad (\text{A.36})$$

Formulierung für 1) Gasphase und 2) Partikelphase

$$1) \quad \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_G \tilde{u}_{G,j}] = \sum_G [\bar{S}_{M,b}]$$

$$2) \quad \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_P \tilde{u}_{P,j}] = \sum_P [\bar{S}_{M,b}]$$

2) mit (B.1)

$$\stackrel{1)}{\Leftrightarrow} \quad \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_G \tilde{u}_{G,j}] = \sum_G [\bar{S}_{M,b}]$$

$$\stackrel{2)}{\Leftrightarrow} \quad \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_P \tilde{u}_{G,j}] = \sum_P [\bar{S}_{M,b}]$$

Addition von 1) und 2)

$$\Leftrightarrow \quad \frac{\partial}{\partial x_j} [(\bar{\rho}_G + \bar{\rho}_P) \tilde{u}_{G,j}] = \sum_G [\bar{S}_{M,b}] + \sum_P [\bar{S}_{M,b}]$$

mit Tabelle 3.8 & (3.5)

$$\Leftrightarrow \quad \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_j] = 0$$

Bilanzgleichung des Impulses in Richtung i

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,i} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{Ph,i,j}^{Wb}] = g_i \bar{\rho}_{Ph} + \tilde{f}_{Ph,i} \bar{\rho}_{Ph} \quad (3.21)$$

Formulierung für 1) Gasphase und 2) Partikelphase

$$1) \quad \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_G \tilde{u}_{G,i} \tilde{u}_{G,j} + \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb}] = g_i \bar{\rho}_G + \tilde{f}_{G,i} \bar{\rho}_G$$

$$2) \quad \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_P \tilde{u}_{P,i} \tilde{u}_{P,j} + \bar{\sigma}_{P,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{P,i,j}^{Wb}] = g_i \bar{\rho}_P + \tilde{f}_{P,i} \bar{\rho}_P$$

2) mit (B.1), (B.4) & (B.5)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_G \tilde{u}_{G,i} \tilde{u}_{G,j} + \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb}] = g_i \bar{\rho}_G + \tilde{f}_{G,i} \bar{\rho}_G$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_P \tilde{u}_{G,i} \tilde{u}_{G,j} + \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} \right] = g_i \bar{\rho}_P + \tilde{f}_{P,i} \bar{\rho}_P$$

Addition von 1) und 2)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\bar{\rho}_G + \bar{\rho}_P) \tilde{u}_{G,i} \tilde{u}_{G,j} + \left(1 + \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \right) \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb} \right] = g_i (\bar{\rho}_G + \bar{\rho}_P) + \tilde{f}_{G,i} \bar{\rho}_G + \tilde{f}_{P,i} \bar{\rho}_P$$

mit Tabelle 3.8 & (3.6)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Tu} + \bar{\sigma}_{G,i,j}^{Wb} \right] = g_i \bar{\rho} \quad (3.38)$$

Bilanzgleichung der Turbulenzenergie

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \tilde{k}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j} + \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{k_{Ph} u_{Ph,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{Ph,i,j}^{Wb} u_{Ph,i}^{**})} \right] \\ & = G_{Ph}^{Bew} + G_{Ph}^{Umw} - \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Tu} - \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Umw} + \bar{\rho}_{Ph} (\widetilde{f_{Ph,i}^{**} u_{Ph,i}^{**}}) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Formulierung für 1) Gasphase und 2) Partikelphase

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_G \tilde{k}_G \tilde{u}_{G,j} + \bar{\rho}_G (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{G,i,j}^{Wb} u_{G,i}^{**})} \right] \\ & = G_G^{Bew} + G_G^{Umw} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} + \bar{\rho}_G (\widetilde{f_{G,i}^{**} u_{G,i}^{**}}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2) \quad & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_P \tilde{k}_P \tilde{u}_{P,j} + \bar{\rho}_P (\widetilde{k_P u_{P,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{P,i,j}^{Wb} u_{P,i}^{**})} \right] \\ & = G_P^{Bew} + G_P^{Umw} - \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Tu} - \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} + \bar{\rho}_P (\widetilde{f_{P,i}^{**} u_{P,i}^{**}}) \end{aligned}$$

2) mit (B.1), (B.2), (B.4), (B.6), (B.7), (B.8) & (B.9)

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_G \tilde{k}_G \tilde{u}_{G,j} + \bar{\rho}_G (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{G,i,j}^{Wb} u_{G,i}^{**})} \right] \\ \Leftrightarrow & = G_G^{Bew} + G_G^{Umw} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} + \bar{\rho}_G (\widetilde{f_{G,i}^{**} u_{G,i}^{**}}) \end{aligned}$$

$$2) \quad \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_P \tilde{k}_G \tilde{u}_{G,j} + \bar{\rho}_P (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) \right] = \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} G_G^{Bew} - G_G^{Umw} - \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} + \bar{\rho}_P (\widetilde{f_{P,i}^{**} u_{P,i}^{**}})$$

Addition von 1) und 2)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\bar{\rho}_G + \bar{\rho}_P) \tilde{k}_G \tilde{u}_{G,j} + (\bar{\rho}_G + \bar{\rho}_P) (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{G,i,j}^{Wb} u_{G,i}^{**})} \right] \\ \Leftrightarrow & = \left(1 + \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \right) G_G^{Bew} + G_G^{Umw} - G_G^{Umw} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} - \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} \\ & + \bar{\rho}_G (\widetilde{f_{G,i}^{**} u_{G,i}^{**}}) + \bar{\rho}_P (\widetilde{f_{P,i}^{**} u_{P,i}^{**}}) \end{aligned}$$

mit Tabelle 3.8

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{k}_G \tilde{u}_j + \bar{\rho} (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{G,i,j}^{Wb} u_{G,i}^{**})} \right] \\ \Leftrightarrow & = \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} G_G^{Bew} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} - \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} + \bar{\rho}_G (\widetilde{f_{G,i}^{**} u_{G,i}^{**}}) + \bar{\rho}_P (\widetilde{f_{P,i}^{**} u_{P,i}^{**}}) \end{aligned}$$

mit (3.32) & (B.10)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{k}_G \tilde{u}_j + \bar{\rho} (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{G,i,j}^{Wb} u_{G,i}^{**})} \right] = \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} G_G^{Bew} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} \quad (3.39)$$

mit (3.12)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{k}_G \tilde{u}_j + \bar{\rho} (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) + \overline{(\sigma_{G,i,j}^{Wb} u_{G,i}^{**} + (\sigma_{G,i,j}^{Wb})'' u_{G,i}^{**})} \right] = \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} G_G^{Bew} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu}$$

mit Tabelle 3.7, Tabelle 3.9, (A.16) & (A.17)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{k}_G \tilde{u}_j + \bar{\rho} (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) \right] \\ \Leftrightarrow & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\mu_G^{ig} \overline{\left(\left(\frac{\partial u_{G,i}^{**}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{G,j}^{**}}{\partial x_i} \right) u_{G,i}^{**} \right)} + \overline{\left((p_G^{Wb})'' u_{G,j}^{**} \right)} + \frac{2}{3} \mu_G^{ig} \overline{\left(\frac{\partial u_{G,k}^{**}}{\partial x_k} u_{G,j}^{**} \right)} \right] \\ & = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\sigma_{G,i,j}^{Wb} (u_{G,i}^{**})} \right] - \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \overline{\sigma_{G,i,j}^{Tu}} \frac{\partial \tilde{u}_{G,i}}{\partial x_j} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} \end{aligned}$$

mit Tabelle 3.5 & Tabelle 3.8

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{k}_G \tilde{u}_j + \bar{\rho} (\widetilde{k_G u_{G,j}^{**}}) + \overline{\left((p_G^{Wb})'' u_{G,j}^{**} \right)} \right] \\ \Leftrightarrow & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\mu_G^{ig} \frac{\partial \tilde{k}_G}{\partial x_j} - \mu_G^{ig} \overline{\left(\frac{\partial u_{G,j}^{**}}{\partial x_i} u_{G,i}^{**} \right)} + \frac{2}{3} \mu_G^{ig} \overline{\left(\frac{\partial u_{G,k}^{**}}{\partial x_k} u_{G,j}^{**} \right)} \right] \\ & = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\sigma_{G,i,j}^{Wb} (u_{G,i}^{**})} \right] - \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \overline{\sigma_{G,i,j}^{Tu}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} \end{aligned} \quad (3.65)$$

Bilanzgleichung der inneren Energie

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_{Ph} \tilde{U}_{Ph} \tilde{u}_{Ph,j} + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{U}_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}^{**}))} + \overline{(\rho_{Ph}(\mathbf{U}_{Ph} \mathbf{u}_{Ph,j}^*))} \right] \\
 & = \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Sb} + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Tu} + \bar{\rho}_{Ph} \varepsilon_{Ph}^{Umw} + \bar{S}_{Str,Ph} + \bar{\rho}_{Ph} \left(\overline{(\mathbf{f}_{Ph,i}^* \mathbf{u}_{Ph,i}^*)} \right)
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

Formulierung für 1) Gasphase und 2) Partikelphase

$$\begin{aligned}
 1) \quad & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_G \tilde{U}_G \tilde{u}_{G,j} + \overline{(\rho_G(\mathbf{U}_G \mathbf{u}_{G,j}^{**}))} + \overline{(\rho_G(\mathbf{U}_G \mathbf{u}_{G,j}^*))} \right] \\
 & = \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Sb} + \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} + \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} + \bar{S}_{Str,G} + \bar{\rho}_G \left(\overline{(\mathbf{f}_{G,i}^* \mathbf{u}_{G,i}^*)} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 2) \quad & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_P \tilde{U}_P \tilde{u}_{P,j} + \overline{(\rho_P(\mathbf{U}_P \mathbf{u}_{P,j}^{**}))} + \overline{(\rho_P(\mathbf{U}_P \mathbf{u}_{P,j}^*))} \right] \\
 & = \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Sb} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Tu} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} + \bar{S}_{Str,P} + \bar{\rho}_P \left(\overline{(\mathbf{f}_{P,i}^* \mathbf{u}_{P,i}^*)} \right)
 \end{aligned}$$

1) mit (3.31); 2) mit (3.26), (3.29) & (B.1)

$$\begin{aligned}
 \Leftrightarrow 1) \quad & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_G \tilde{U}_G \tilde{u}_{G,j} + \overline{(\rho_G(\mathbf{U}_G \mathbf{u}_{G,j}^{**}))} + \overline{(\rho_G(\mathbf{U}_G \mathbf{u}_{G,j}^*))} \right] \\
 & = \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Sb} + \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} + \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} + \bar{S}_{Str,G}
 \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow 2) \quad \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_P \tilde{U}_P \tilde{u}_{G,j} + \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \overline{(\rho_G(\mathbf{U}_G \mathbf{u}_{G,j}^{**}))} \right] = \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Sb} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Tu} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} + \bar{S}_{Str,P}$$

mit Tabelle 3.6 & Tabelle 3.7

$$\Leftrightarrow 1) \quad \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_G \tilde{U}_G \tilde{u}_{G,j} + \bar{q}_{leit,G,j}^{Tu} + \bar{q}_{leit,G,j}^{Wb} \right] = \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Sb} + \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} + \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} + \bar{S}_{Str,G}$$

$$\Leftrightarrow 2) \quad \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}_P \tilde{U}_P \tilde{u}_{G,j} + \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \bar{q}_{leit,G,j}^{Tu} \right] = \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Sb} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Tu} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} + \bar{S}_{Str,P}$$

Addition von 1) und 2)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\bar{\rho}_G \tilde{U}_G + \bar{\rho}_P \tilde{U}_P) \tilde{u}_{G,j} + \left(1 + \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \right) \bar{q}_{leit,G,j}^{Tu} + \bar{q}_{leit,G,j}^{Wb} \right] \\ \Leftrightarrow & = \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Sb} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Sb} + \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Tu} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Tu} + \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} + \bar{S}_{Str,G} + \bar{S}_{Str,P} \end{aligned}$$

mit (3.30)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\bar{\rho}_G \tilde{U}_G + \bar{\rho}_P \tilde{U}_P) \tilde{u}_{G,j} + \left(1 + \frac{\bar{\rho}_P}{\bar{\rho}_G} \right) \bar{q}_{leit,G,j}^{Tu} + \bar{q}_{leit,G,j}^{Wb} \right] \\ \Leftrightarrow & = \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} + \bar{S}_{Str,G} + \bar{S}_{Str,P} \end{aligned}$$

mit Tabelle 3.8

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{U} \tilde{u}_j + \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \bar{q}_{leit,G,j}^{Tu} + \bar{q}_{leit,G,j}^{Wb} \right] = \bar{\rho}_G \varepsilon_G^{Umw} + \bar{\rho}_P \varepsilon_P^{Umw} + \bar{S}_{Str}$$

mit (3.32), (3.33) & (3.34)

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \cdot \Delta \tilde{U}_{th} \cdot \tilde{u}_j + \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_G} \bar{q}_{leit,G,j}^{Tu} + \bar{q}_{leit,G,j}^{Wb} \right] = \bar{S}_{Str} + \bar{S}_{chem} \quad (3.40)$$

C Feuerungsunabhängige Stoffwerte

Integrale isochore Wärmekapazität der Bestandteile der Gasphase

Die Berechnung der integralen isochoren Wärmekapazität jedes Bestandteils der Gasphase, außer Ruß, erfolgt durch ein Polynom vierten Grades, wie es nachstehend in Gleichung (C.1) dargestellt ist. Hierbei ist die integrale isochore Wärmekapazität der Teerstoffe vereinfachend der integralen isochoren Wärmekapazität von Methan gleichgesetzt. Die integrale Wärmekapazität von Ruß ist vereinfachend der spezifischen Wärmekapazität von Graphit gleichgesetzt, die $715 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ beträgt.

$$c_b^{v,ig} = \sum_{i=0}^{i=4} \left[1000 \cdot C_{c,i,b} \left(\frac{\tilde{T}_G}{2500\text{K}} \right)^i \right] \quad (\text{C.1})$$

Tabelle C.1: Koeffizienten zur Bestimmung der integralen isochoren Wärmekapazität

<i>b</i>	$C_{c,0,b}$	$C_{c,1,b}$	$C_{c,2,b}$	$C_{c,3,b}$	$C_{c,4,b}$
<i>CH4</i>	1,2222	3,1573	5,2118	-9,0287	3,8900
<i>CO</i>	0,7506	-0,2172	1,4830	-1,8011	0,7043
<i>CO2</i>	0,4605	1,8051	-2,5463	1,9567	-0,6113
<i>H2</i>	9,9585	2,4880	-6,1222	10,433	-5,027
<i>H2O</i>	1,3783	-0,0633	2,2950	-2,3813	0,8055
<i>N2</i>	0,7566	-0,2676	1,4727	-1,7017	0,6476
<i>O2</i>	0,6142	0,3156	0,2560	-0,6765	0,3432
<i>SO2</i>	0,3700	1,1465	-1,6817	1,2614	-0,3739

Die in der vorstehenden Tabelle aufgeführten Koeffizienten sind mittels Regression von entsprechenden Stützstellen aus dem FDBR-Handbuch [154] bestimmt worden. Als Stützstellen dienen die entsprechenden Stoffwerte im Bereich zwischen 0 und $2000 \text{ }^\circ\text{C}$ in einem Intervall von 50 K . Die relative Abweichung der Regression von den Stützstellen beträgt im Mittel etwa $0,1\%$. Der durch Gleichung (C.1) wiedergegebene Verlauf der integralen isochoren Wärmekapazität jedes Bestandteils der Gasphase ist nachstehend verdeutlicht:

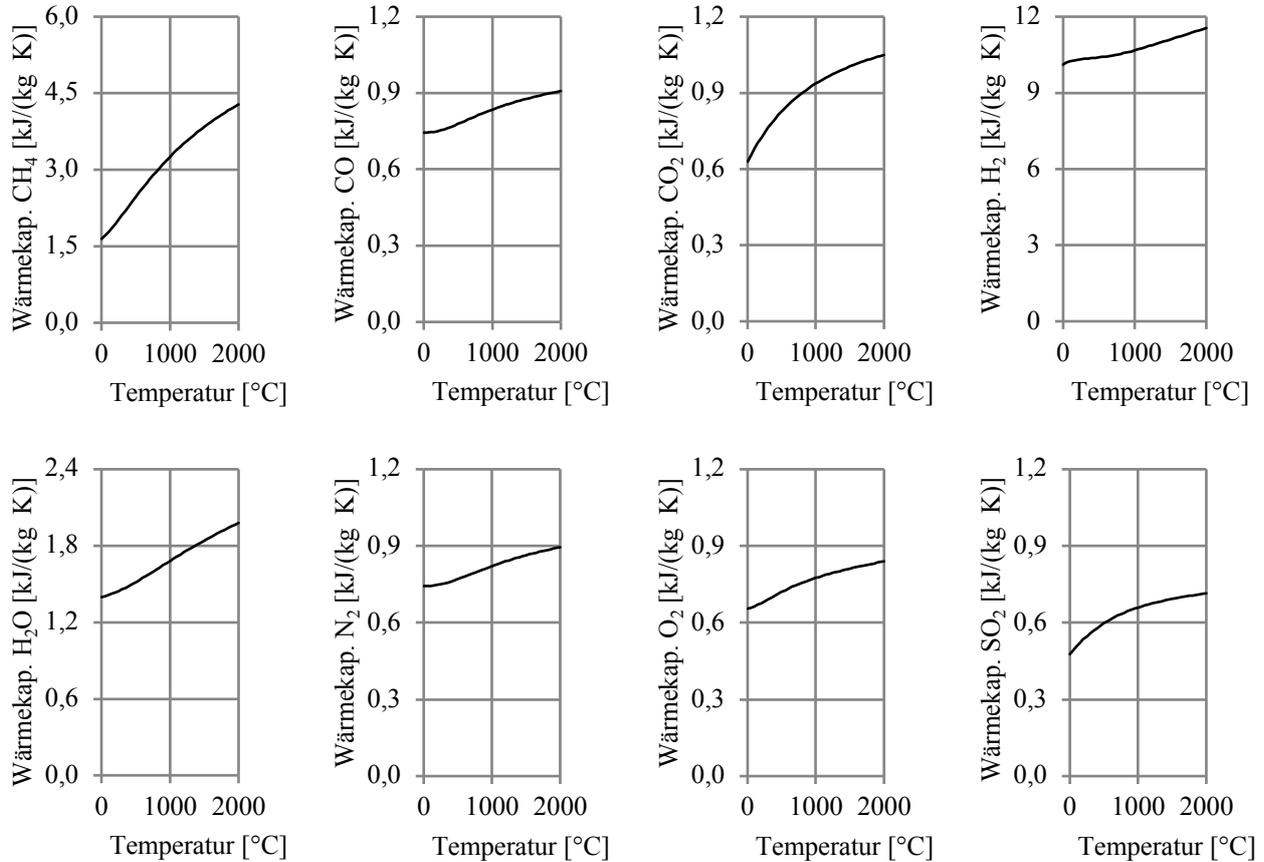


Abbildung C-1: Integrale isochore Wärmekapazität der gasförmigen Bestandteile

Integrale Wärmekapazität der Bestandteile der Partikelphase

Die integrale Wärmekapazität der mineralstofffreien Kokssubstanz ist vereinfachend der integralen Wärmekapazität von Kohle im wasser- und aschefreien Zustand gleichgesetzt. Für die integrale Wärmekapazität von Kohle im wasser- und aschefreien Zustand und von Asche gelten folgende Berechnungsvorschriften (vgl. [155]):

$$c_{mwfKL} = 691 + 0,71 \frac{T^2 - T_{ref}^2}{T - T_{ref}} - 197 \frac{1}{T - T_{ref}} \left[\left(\frac{T}{1000} \right)^3 - \left(\frac{T_{ref}}{1000} \right)^3 \right] \quad (C.2)$$

$$c_A = 780 + \frac{1,36}{T - T_{ref}} (T - 273)^{1,66} \quad (C.3)$$

Die vorstehenden Berechnungsvorschriften sind nachfolgend veranschaulicht:

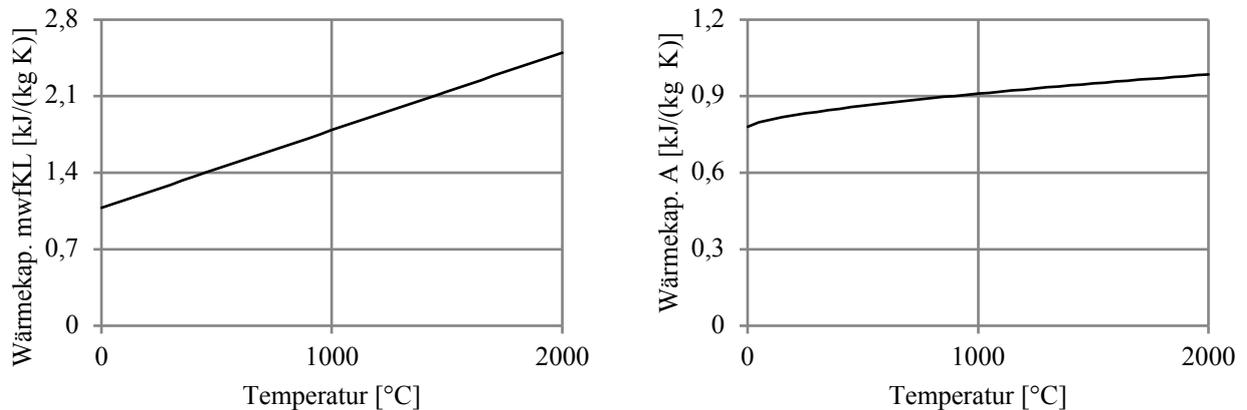


Abbildung C-2: integrale Wärmekapazität wasser- und aschefreier Kohle und Asche [155]

Die integrale Wärmekapazität des in der Kohle adsorbierten Wassers ist vereinfachend als konstant angenommen. Sie nehme einen Wert von $4,2 \text{ kJ}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ an.

Heizwerte im Referenzzustand

Tabelle C.2: Heizwerte im Referenzzustand

Stoff	CO	H_2	CH_4
Heizwert H_u in MJ/kg	10,10	120,0	50,01

Gleichgewichtsfeuchte von Kohle

Der Verlauf der Gleichgewichtsfeuchte von Kohle über die relative Feuchtigkeit φ_G der Gasphase sei durch den folgenden Ansatz abstrahiert:

$$x_{P,H_2O}^{Ggw} = 100 \frac{g H_2O}{kg Kohle wf} \cdot C_{Ggf,1} \cdot C_{Ggf,2} \cdot [-\ln(1 - \varphi_G)]^{C_{Ggf,3} \cdot C_{Ggf,4}} \quad (C.4)$$

Die Parameter $C_{Ggf,1}$ und $C_{Ggf,3}$ symbolisieren den Einfluss des Kohlenaufbaus auf den Verlauf der Gleichgewichtsfeuchte bei einer Temperatur von $40^\circ C$. Mit der multiplikativen Änderung dieses Vorfaktors bzw. Exponenten um die Parameter $C_{Ggf,2}$ bzw. $C_{Ggf,4}$ ist der Einfluss der Temperatur auf die Gleichgewichtsfeuchte berücksichtigt. Die Bestimmung der Parameter $C_{Ggf,1}$ bis $C_{Ggf,4}$ basiert auf einer Regression der in Abbildung 3-4 dargestellten Gleichgewichtsfeuchte von Rheinischer

Braunkohle nach Opdenwinkel [98] und der in Abbildung 3-5 dargestellten Gleichgewichtsfeuchte von verschiedenen Steinkohlen nach Grünekle [99] durch Gleichung (C.4). Die Parameter jeder Sorptionsisothermen sind wiederum entsprechend regressiert, wie es nachstehend aufgeführt ist:

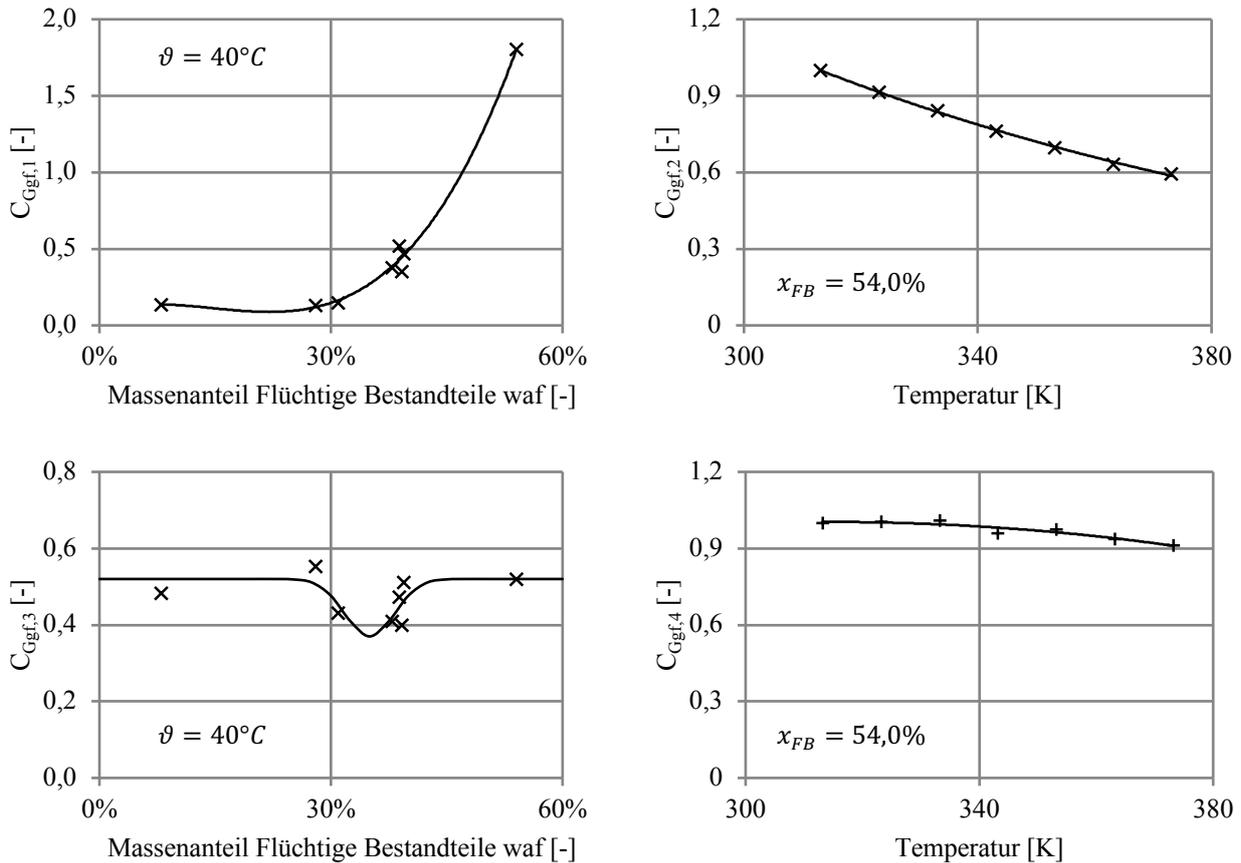


Abbildung C-3: Regression der Parameter der Gleichgewichtsfeuchte

$$C_{Ggf,1} = 30,989x_{FB}^3 - 13,629x_{FB}^2 + 1,4938x_{FB} + 0,08906 \quad (C.5)$$

$$C_{Ggf,2} = 16,078 \cdot \exp(-8,8728 \cdot 10^{-3} \cdot T) \quad (C.6)$$

$$C_{Ggf,3} = 0,52 - 0,15 \cdot \exp\left[-\left(\frac{x_{FB}-0,35}{0,045}\right)^2\right] \quad (C.7)$$

$$C_{Ggf,4} = -2,684 \cdot 10^{-5}T^2 + 1,687 \cdot 10^{-2}T - 1,646 \quad (C.8)$$

Die relative Abweichung der nach Gleichung (C.4) berechneten Gleichgewichtsfeuchte von der gemessenen Gleichgewichtsfeuchte Rheinischer Braunkohle nach Opdenwinkel [98] und verschiedener

Steinkohlen nach Grünekle [99] beträgt im Mittel 5%. Der Verlauf der gemäß Gleichung (C.4) berechneten Gleichgewichtsfeuchte Rheinischer Braunkohle und verschiedener Steinkohlen ist nachstehend veranschaulicht.

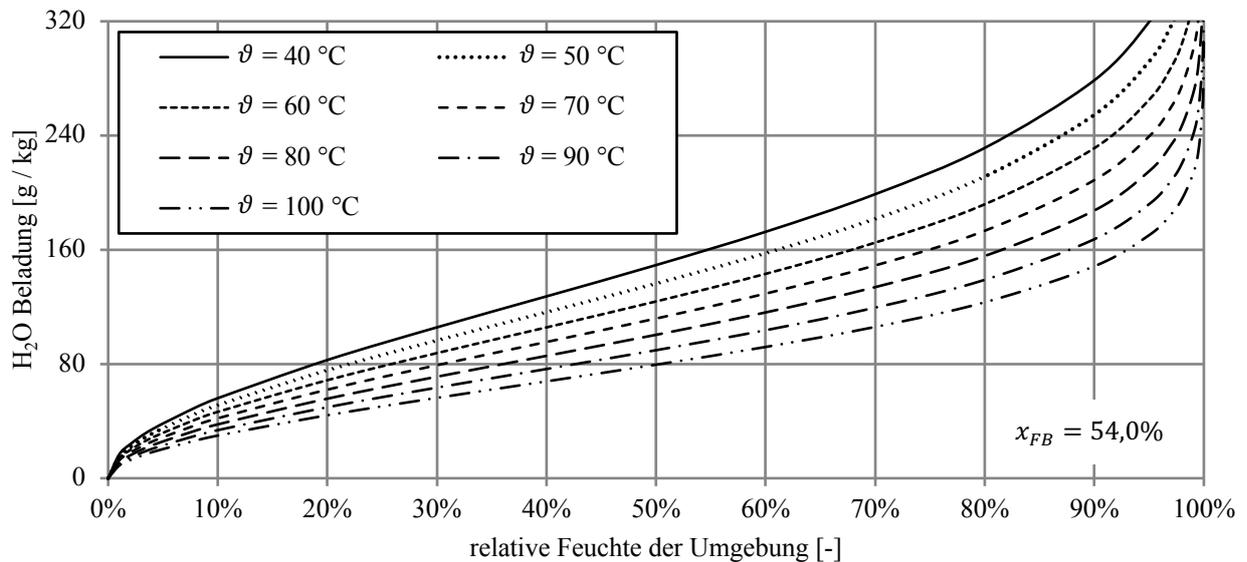


Abbildung C-4: Regression der Gleichgewichtsfeuchte Rheinischer Braunkohle

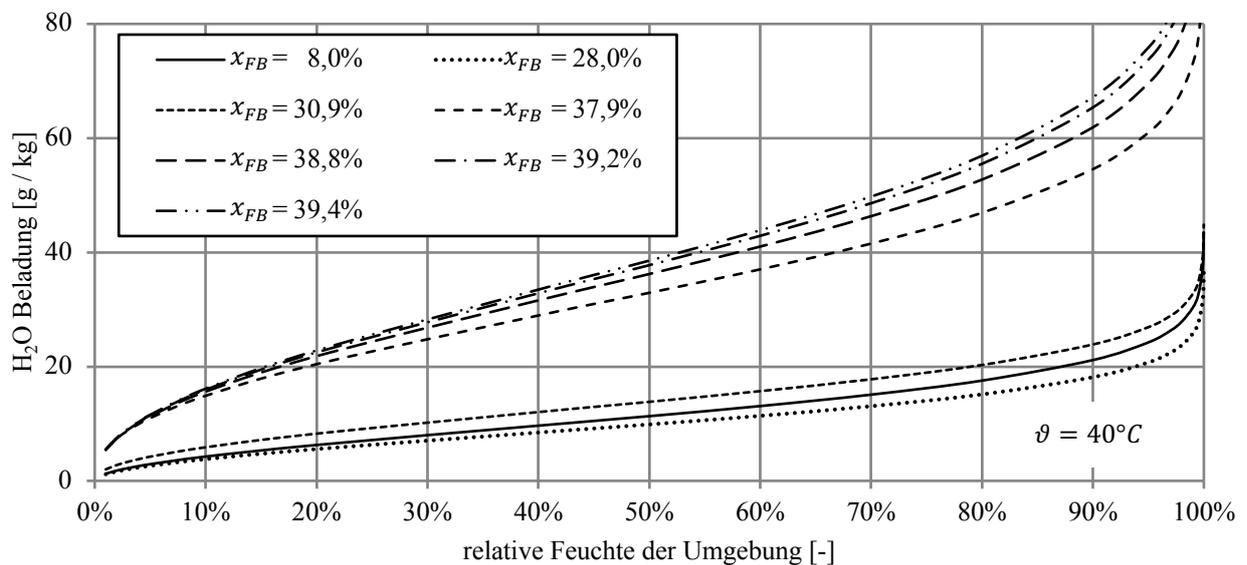


Abbildung C-5: Regression der Gleichgewichtsfeuchte verschiedener Steinkohlen

Zur weiteren Bewertung des regressierten Verlaufes der Gleichgewichtsfeuchte nach Gleichung (C.4) ist der Verlauf der hygroskopischen Feuchtigkeit nachgerechnet und in der nachstehenden Abbildung mit entsprechenden Messwerten von Zelkowski [156] verglichen. Die hygroskopische Feuchtigkeit

entspricht nach DIN 51718 [4] der Beladung einer Kohle im Gleichgewichtszustand bei einer relativen Feuchtigkeit von etwa 50% und einer Temperatur von 30°C. Da Zelkowski [156] die hygroskopische Feuchte als Funktion des Kohlenstoffgehaltes angibt, ist mittels eines entsprechenden empirischen Zusammenhanges, ebenfalls von Zelkowski [157], vom Kohlenstoffgehalt auf den Anteil an Flüchtigen Bestandteilen geschlossen.

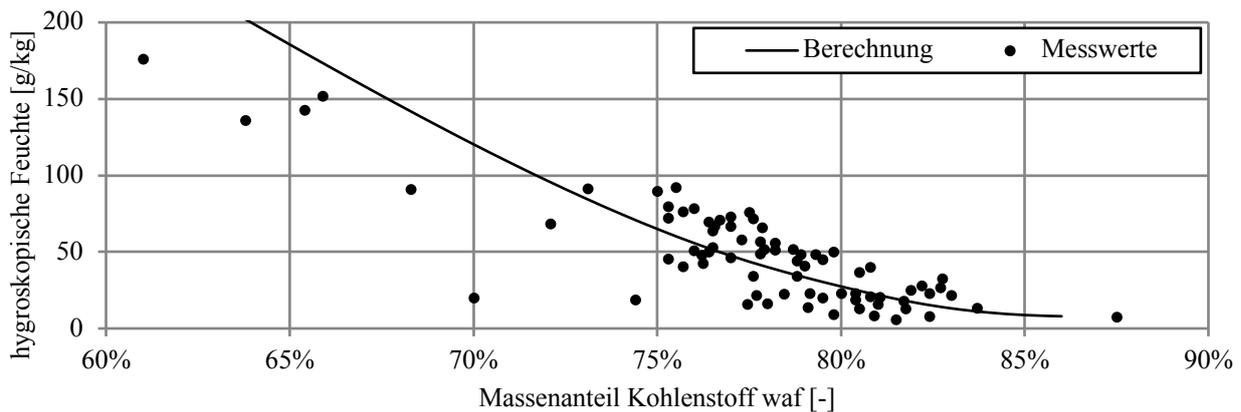


Abbildung C-6: Vergleich von Regression und Messwerten [156] der hygroskopischen Feuchtigkeit

Mithilfe der Regression der Gleichgewichtsfeuchte nach Gleichung (C.4) können die Messwerte von Opdenwinkel [98], Grünekleee [99] und Zelkowski [156] so gut wiedergegeben werden, dass von einer ausreichenden Genauigkeit der Approximation der Gleichgewichtsfeuchte von Kohle für den Zweck der Simulation ausgegangen ist.

Diffusionskoeffizient von Sauerstoff

Für den Diffusionskoeffizienten von Sauerstoff in einem Sauerstoff-Stickstoff-Gemisch gilt nach Field et al. [121] die folgende Berechnungsgleichung:

$$\beta_{O_2,p} = 1,5809 \cdot 10^{-5} \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1,75} \quad (C.9)$$

D Bestimmtheit der Energiebilanz des Gesamtprozesses

Die Energiebilanz des Gesamtprozesses unterteilt sich in 10 bruttoreaktionsspezifische Energiebilanzen. Welche Größe mithilfe jeder dieser Energiebilanzen bestimmt wird, geht aus der folgenden Tabelle hervor.

Tabelle D.1: Übersicht Bruttoreaktionen

Index r	umwandlungsrelevanter Teilprozess	berechnete Größe
0_ p	Trocknung der mineralstofffreien Kohlesubstanz	$H_{u,mwfKL,p}$
I_ p	Primärpyrolyse der mineralstoff- und wasserfreien Kohlesubstanz	$H_{u,mfKK,p}$
II_ p	Umwandlung der mineralstofffreien Kokssubstanz	$\Delta h_{Rea,II,p}$
III	Abbrand von Methan	$\Delta h_{Rea,III}$
IV	Abbrand von Kohlenstoffmonoxid	$\Delta h_{Rea,IV}$
V	Abbrand von Wasserstoff	$\Delta h_{Rea,V}$
VI	Abbrand von Teerstoffen	$\Delta h_{Rea,VI}$
VII	Sekundärpyrolyse der Teerstoffe	$\Delta h_{Rea,VII}$
VIII	Abbrand von Ruß	$\Delta h_{Rea,VIII}$
IX	Sekundärpyrolyse der Teerstoffe	$H_{u,TS}$

Die in der vorstehenden Tabelle nicht aufgeführten Reaktionsenthalpien und Heizwerte sind durch verschiedene Randbedingungen festgelegt, wie in Unterkapitel 3.3.4 beschrieben ist. Somit ist die Energiebilanz des Gesamtprozesses weder unter- noch überbestimmt.

E Emissionsgrad der Gasphase

Emissionsgrad von Wasserdampf und Kohlenstoffdioxid

Die Berechnung des Emissionsgrads von Wasserdampf und Kohlenstoffdioxid erfolgt auf vergleichbare Weise (vgl. [158]):

$$\varepsilon_b = \varepsilon_b^{p0} - \varepsilon_b^{p0} \frac{(C_{1,b}^\varepsilon - 1)(1 - p_b^{eff})}{C_{1,b}^\varepsilon + C_{2,b}^\varepsilon - 1 + p_b^{eff}} \cdot \exp \left[-C_{3,b}^\varepsilon \left(\log_{10} \left(\frac{C_{4,b}^\varepsilon}{p_b \delta} \right) \right)^2 \right] \quad (\text{E.1})$$

$$\varepsilon_b^{p0} = \exp \left[\sum_{i=2}^{\infty} \sum_{j=0}^{j=3} C_{j,i,b}^\varepsilon \left(\frac{T_G}{1000K} \right)^j \left(\log_{10}(0,001 p_b \delta) \right)^i \right] \quad (\text{E.2})$$

mit

Parameter	Wert für Wasserdampf	Wert für Kohlenstoffdioxid
	bei $T_G < 750 \text{ K}$:	
$C_{1,b}^\varepsilon$	2,144	$1 + 0,1 \left(\frac{T_G}{1000} \right)^{-1,45}$
	bei $T_G \geq 750 \text{ K}$:	
$C_{1,b}^\varepsilon$	$1,888 - 2,053 \cdot \log_{10} \left(\frac{T_G}{1000} \right)$	
$C_{2,b}^\varepsilon$	$1,1 \left(\frac{T_G}{1000} \right)^{-1,4}$	0,23
$C_{3,b}^\varepsilon$	0,5	1,47
		bei $T_G < 700 \text{ K}$:
$C_{4,b}^\varepsilon$	$0,132 \left(\frac{T_G}{1000} \right)^2 [\text{bar m}]$	$0,00054 \left(\frac{T_G}{1000} \right)^{-2} [\text{bar m}]$
		bei $T_G \geq 700 \text{ K}$:
$C_{4,b}^\varepsilon$		$0,00225 \left(\frac{T_G}{1000} \right)^{-2} [\text{bar m}]$
p_b^{eff}	$\frac{p}{100000} + \frac{2,56 p_b}{100000} \left(\frac{T_G}{1000} \right)^{-0,5}$	$\frac{p}{100000} + \frac{0,28 p_b}{100000}$

$C_{0,0,b}^\varepsilon$	-2,2118	-3,9893
$C_{0,1,b}^\varepsilon$	0,85667	1,2710
$C_{0,2,b}^\varepsilon$	-0,10838	-0,23678
$C_{1,0,b}^\varepsilon$	-1,1987	2,7669
$C_{1,1,b}^\varepsilon$	0,93048	-1,1090
$C_{1,2,b}^\varepsilon$	-0,17156	0,19731
$C_{2,0,b}^\varepsilon$	0,035596	-2,1081
$C_{2,1,b}^\varepsilon$	-0,14391	1,0195
$C_{2,2,b}^\varepsilon$	0,045915	-0,19544
$C_{3,0,b}^\varepsilon$	0,0000	0,39163
$C_{3,1,b}^\varepsilon$	0,0000	-0,21897
$C_{3,2,b}^\varepsilon$	0,0000	0,044644

Bandenüberlappung

Für die Bandenüberlappung von Wasserdampf und Kohlenstoffdioxid gilt folgende Berechnungsvorschrift (vgl. [158]):

$$\Delta\varepsilon = \left(\frac{C_{5,b}^\varepsilon}{10,7+101C_{5,b}^\varepsilon} - 0,0089C_{5,b}^{\varepsilon 10,4} \right) \left(\log_{10} \left(\frac{p_{H_2O}+p_{CO_2}}{1000} \delta \right) \right)^{2,76} \quad (\text{E.3})$$

$$C_{5,b}^\varepsilon = \frac{p_{H_2O}}{p_{H_2O}+p_{CO_2}} \quad (\text{E.4})$$

F Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse

Tabelle F.1: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse

Nummer	Beginn untere Flamme [cm]	Länge untere Flamme [cm]	Beginn obere Flamme [cm]	Länge obere Flamme [cm]	Glühverlust Strahlungsraumende [-]
01	116	311	111	322	0,52%
02	125	256	121	263	0,82%
03	116	311	111	322	0,52%
04	125	260	121	263	0,82%
05	116	311	111	322	0,52%
06	125	260	121	263	0,81%
07	116	311	111	322	0,52%
08	125	256	121	263	0,82%
09	116	343	111	361	2,34%
10	125	283	121	292	3,37%
11	116	343	111	361	2,33%
12	125	279	121	302	3,37%
13	116	343	111	361	2,32%
14	125	279	121	302	3,35%
15	116	343	111	361	2,34%
16	125	279	121	302	3,38%

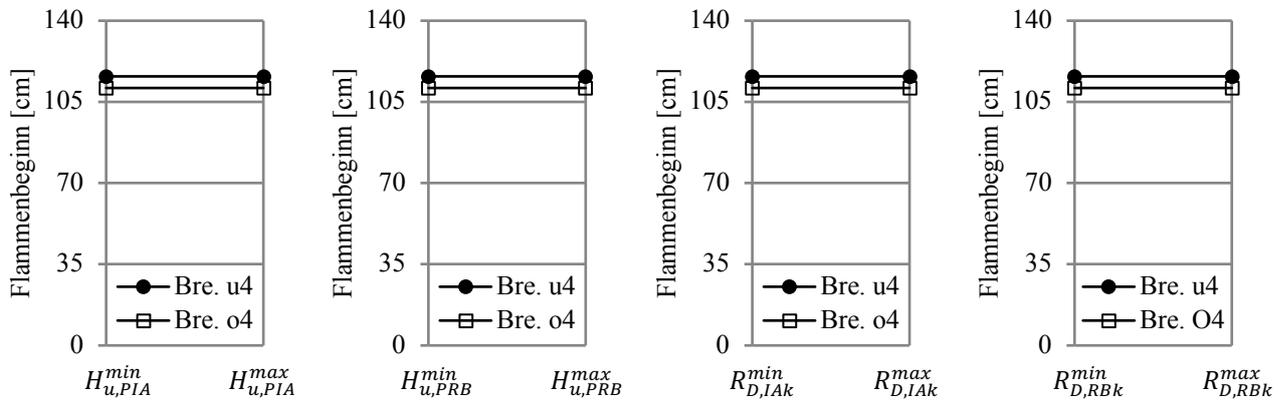


Abbildung F-1: Auswirkung der Prozessmerkmale auf den Flammenbeginn für \dot{Q}_{RBK}^{min}

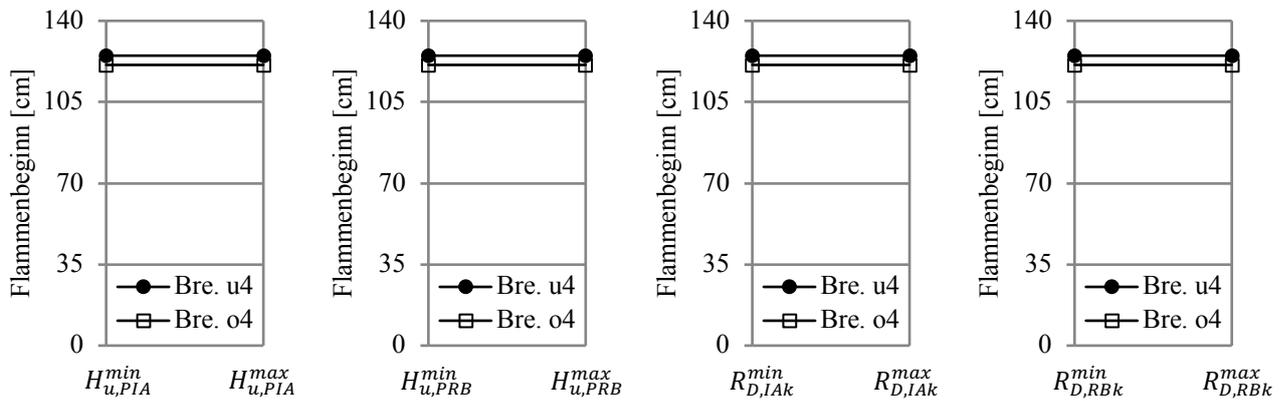


Abbildung F-2: Auswirkung der Prozessmerkmale auf den Flammenbeginn für \dot{Q}_{RBK}^{max}

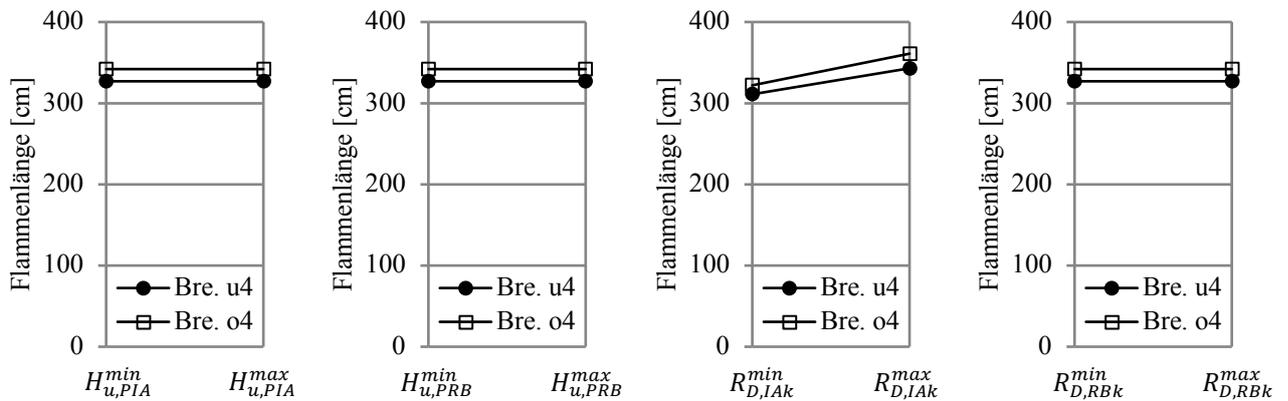


Abbildung F-3: Auswirkung der Prozessmerkmale auf die Flammenlänge für \dot{Q}_{RBK}^{min}

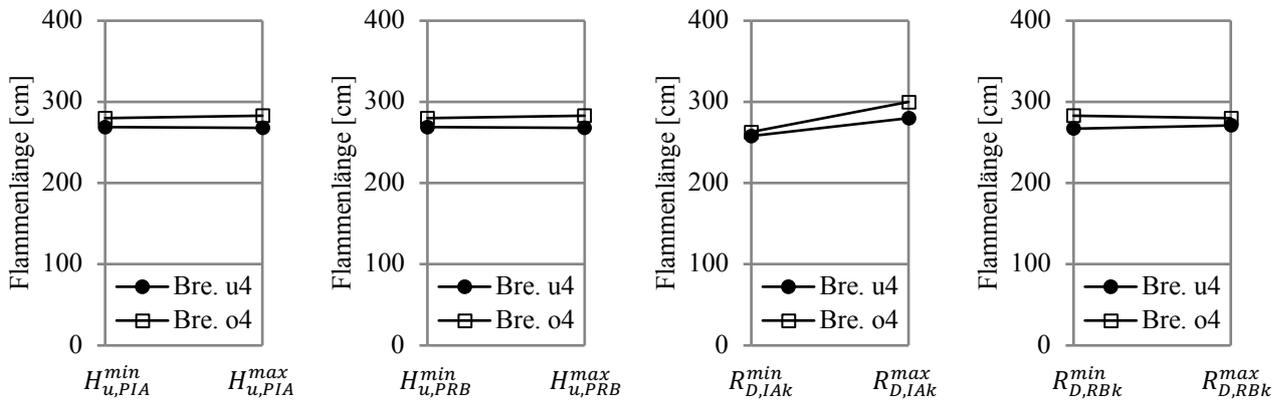


Abbildung F-4: Auswirkung der Prozessmerkmale auf die Flammenlänge für \dot{Q}_{RBK}^{max}

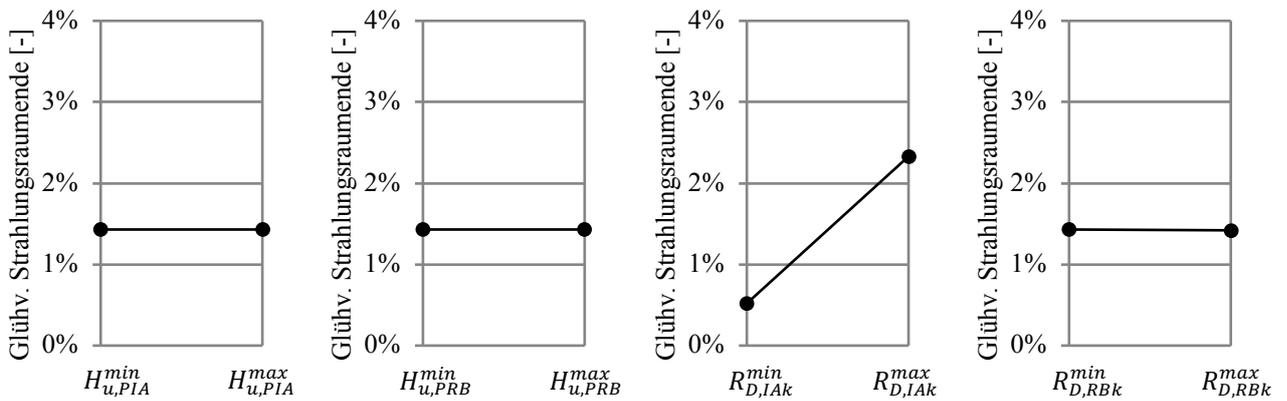


Abbildung F-5: Auswirkung der Prozessmerkmale auf den Glühverlust am Strahlungsraumende für \dot{Q}_{RBK}^{min}

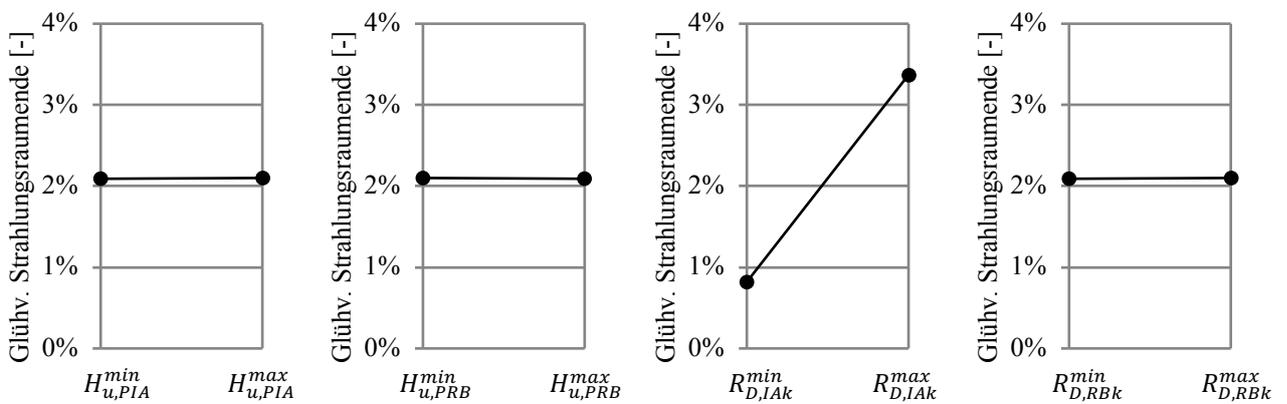


Abbildung F-6: Auswirkung der Prozessmerkmale auf den Glühverlust am Strahlungsraumende für \dot{Q}_{RBK}^{max}

Lebenslauf

Persönliches

Name: Kamil Marcak
Geburtsdatum: 22. August 1985
Geburtsort: Tarnowitz (Polen)
Staatsangehörigkeit: Deutsch

Ausbildung

08/1996 – 06/2005 Abitur am erzb. Suitbertus Gymnasium, Düsseldorf
10/2005 – 12/2011 Diplom für Maschinenbau an der RWTH Aachen

Beruflicher Werdegang

01/2012 – 06/2015 Projektingenieur bei der RWE Technology
09/2015 – 12/2017 Projektingenieur bei der RWE Power AG im Auftrag der PQM GmbH
01/2018 – 07/2019 Projektingenieur bei der RWE Power AG
08/2019 – 10/2022 Referent Kesseltechnik im MHKW Essen bei der RWE Generation SE
seit 11/2022 Teamleiter Maschinen- und Apparatechnik im MHKW Essen
bei der RWE Generation SE