



Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	xii
Tabellenverzeichnis	xiv
Nomenklatur	xvi
1. Einleitung	1
1.1. Motivation und Ziele der Arbeit	2
1.2. Gliederung dieser Arbeit	6
2. Stand des Wissens	8
2.1. Hochtemperaturkorrosion in Kohlekraftwerken	8
2.2. Wärmestrahlung in Oxyfuel-Kraftwerken	13
3. Modellierung der Kohleverbrennung	18
3.1. Modifizierter Euler-Euler-Ansatz	18
3.1.1. Reaktionsmechanismus	19
3.1.2. Pyrolyse, Koksoxidation und -vergasung	20
3.1.3. Korrektur der Partikeltemperatur	26
3.2. Euler-Lagrange-Modell	28
3.2.1. Bewegungsgleichung der Partikel	28
3.2.2. Modellierung des Verbrennungsprozesses	29
3.3. Volumetrische Reaktionen	32
3.3.1. Finite-Rate-Chemie	33
3.3.2. Eddy-Dissipation Model/Concept	36
3.3.3. In-Situ Adaptive Tabulation	38
3.4. Modellierung der Wärmestrahlung	41
3.4.1. Zweiband-Modell	41
3.4.2. Weighted-Sum of Grey-Gases Modell	42



3.4.3. Strahlungseigenschaften der Partikel	46
4. Freisetzung schwefel- und chlorhaltiger Verbindungen	51
4.1. Charakterisierung des in der Kohle enthaltenen Schwefels und Chlors	51
4.1.1. Schwefel	52
4.1.2. Chlor	53
4.2. Bestimmung der Mineralverteilung	54
4.2.1. Messtechnische Bestimmung	55
4.2.2. Empirische Bestimmung	56
4.2.3. Rechnerische Bestimmung	58
4.2.4. Anwendung und Überprüfung des Verfahrens	60
4.3. Umwandlungsreaktionen der Mineralien und Freisetzung korrosiver Gase	64
4.3.1. Übersicht über das Gesamtmodell	64
4.3.2. Anorganisch gebundener Schwefel	65
4.3.3. Anorganisch gebundenes Chlor	68
4.3.4. Organisch gebundene Schwefel- und Chlorverbindungen	69
4.4. Modellierung der Mineralumwandlungen	70
4.5. Gasphasen-Reaktionsmechanismus	76
4.5.1. Kohlenwasserstoffmechanismus	76
4.5.2. Schwefel- und Chlormechanismen	82
4.6. Anmerkungen zur Implementierung des Modells	86
5. Validierung und Test des Modells zur Vorhersage korrosiver Atmosphären	88
5.1. Validierung an Messungen im Flugstromreaktor	88
5.1.1. Aufbau des Flugstromreaktors	89
5.1.2. Numerisches Setup und Randbedingungen	90
5.1.3. Ergebnisse Flugstromreaktor	93
5.2. Anwendung auf eine Technikumsanlage	107
5.2.1. Aufbau der Brennkammer	107
5.2.2. Numerisches Setup und Randbedingungen	109
5.2.3. Ergebnisse Versuchsbrennkammer	111
6. Anwendung der Modelle auf Kraftwerkskessel	118
6.1. Bestimmung des Korrosionsrisikos mittels Simulation	118
6.1.1. Beschreibung des Kessels und Randbedingungen der Simulation	118
6.1.2. Ergebnisse der Simulation	122



6.2. Simulation eines Oxyfuel-Kraftwerkessels	127
6.2.1. Beschreibung des Kessels und der Randbedingungen der Simulation .	127
6.2.2. Ergebnisse der Simulationen	132
7. Zusammenfassung und Ausblick	139
Literaturverzeichnis	143
A. Anhang	157