

Technische Universität München
Institut für Energietechnik

Lehrstuhl für Thermodynamik

Untersuchungen zu einem Verbrennungskonzept für Mikrogasturbinen im Kontext mit chemischen Wasserstoffspeichertechnologien

Balbina Caecilia Hampel

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen der
Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades
eines

DOKTOR – INGENIEURS

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender:

Prof. Dr. rer. nat. Tim C. Lüth

Prüfer der Dissertation:

1. Prof. Dr.-Ing. Thomas Sattelmayer
2. Prof. Dr.-Ing. habil. Manfred C. Wirsum

Die Dissertation wurde am 27.06.2018 bei der Technischen Universität München eingereicht
und durch die Fakultät für Maschinenwesen am 26.11.2018 angenommen.

„Science doesn't always go forwards. It's a bit like doing a Rubik's cube. You sometimes have to make more of a mess with a Rubik's cube before you can get it to go right.“

- Jocelyn Bell Burnell, britische Radioastronomin
in *Beautiful Minds*, BBC, 2010

Danksagung

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für Thermodynamik der Technischen Universität München. Sie wurde durch den Forschungsverbund *Bavarian Hydrogen Center* (BHC) finanziert.

Meinem Doktorvater Prof. Dr.-Ing. Thomas Sattelmayer gilt mein besonderer Dank für die Betreuung und die Übernahme des Hauptreferats dieser Arbeit. Durch den großen Freiraum, der mir während der ganzen Zeit gewährt wurde, konnte ich viel lernen. Dankbar bin ich auch für sein gezieltes Hinterfragen von Sachverhalten und die Diskussionen, die entscheidend für das Gelingen dieser Arbeit waren. Auch danke ich Prof. Dr.-Ing. habil. Manfred C. Wirsum für die Übernahme des Koreferats und Prof. Dr. rer. nat. Tim C. Lüth für die Übernahme des Vorsitzes in der mündlichen Prüfung.

Ebenso möchte ich mich ganz herzlich bei Dr. Christoph Hirsch bedanken, der durch seine viele Erfahrung in experimentellen Belangen und mit seinem großen Wissen über die Mikrogasturbine mir eine große Hilfe war. Allen Mitarbeitern der mechanischen und elektrischen Werkstatt danke ich für ihren Einsatz beim Aufbau unserer Versuchsstände. Sigrid Schulz-Reichwald und Helga Bassett sei für ihre Unterstützung in sämtlichen administrativen Dingen rund um das Wissenschaftlerinnen-Dasein gedankt.

Ein großer Dank geht auch an meine lieben Projekt- und Bürokollegen Stefan Bauer und Norbert Heublein. Ich werde die Zusammenarbeit mit beiden in sehr guter Erinnerung behalten. Bei allen Kolleginnen und Kollegen des Lehrstuhls möchte ich mich bedanken für die gute und kollegiale Zusammenarbeit, für die freundschaftliche Atmosphäre und für den Zusammenhalt am Lehrstuhl. Ebenso danke ich all unseren Studenten, die im Rahmen unseres Projekts mitgearbeitet haben. Es war mir immer ein große Freude mit ihnen zusammenzuarbeiten.

Bedanken möchte ich mich ausdrücklich bei meinen beiden Korrekturlesern Dr. Josef Jörg und Dr. Christoph Jörg. Mit ihrer Begeisterung für die Wissenschaft waren sie mir eine große Unterstützung.

Meinen Eltern Balbina und Franz und meinen Schwestern Johanna und Franziska danke ich von ganzem Herzen. Sie haben mich über die Jahre bedingungslos unterstützt, mir den Rücken gestärkt und mir immer wieder den Blick für das Wesentliche gegeben. Danke!

München, im Mai 2019

Balbina Hampel

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit stickoxidarmer Wasserstoffverbrennung für Mikrogasturbinen, die in einen Speicherzyklus, der auf flüssigen organischen Wasserstoffspeichern basiert, integriert sind. Der Abgasenthalpiestrom der Mikrogasturbine kann so für die Aufrechterhaltung der endothermen Freisetzungsreaktion des Wasserstoffs (Dehydrierung) aus dem chemischen Wasserstoffträger genutzt werden. Der freigesetzte Wasserstoff wird in der Mikrogasturbine zur Energiegewinnung eingesetzt.

Für ein System, bestehend aus Mikrogasturbine und Dehydriereinheit, wird ein thermodynamisches Modell erstellt und mit genetischen Algorithmen optimiert. Mit Hilfe von 3D-Strömungssimulationen und experimentellen Untersuchungen bei Umgebungsbedingungen wird eine neue Brennkammer für das Regime der verdünnten Verbrennung entwickelt, die sowohl mit Wasserstoff als auch mit Erdgas betrieben werden kann. Im für die Gasturbine relevanten Betriebsbereich können die Stickoxidemissionen der entwickelten Brennkammer für beide Brennstoffe auf 1 ppm bis 2 ppm reduziert werden. Simulationen mit Reaktormodellen zeigen, dass die Brennkammer auch bei einem Druck von 4,5 bar einsetzbar sein sollte.

Abstract

The study at hand investigates low NO_x hydrogen combustion for micro gas turbines, with special focus on using the gas turbine coupled with a storage cycle for liquid organic hydrogen carriers. In the coupled system, the exhaust gas enthalpy of the micro gas turbine is used to maintain the endothermal dehydrogenation reaction which releases hydrogen from the carrier molecule. The gaseous hydrogen fuels the micro gas turbine for power generation.

A system comprising a micro gas turbine and a dehydrogenation unit is modeled by a thermodynamic model, which is used to optimize the system with genetic algorithms. A new combustion chamber for diluted combustion is developed from the results of 3D numerical flow simulations and experiments under atmospheric conditions. The new design can be operated on either hydrogen or natural gas fuel and achieves emission levels in the range of 1 ppm to 2 ppm NO_x. Simulations with reactor models suggest the design's operability at elevated pressure of 4.5 bar.

Inhaltsverzeichnis

Seite

Symbolverzeichnis	xv
1 Einleitung	1
1.1 Speicherung von Wasserstoff	1
1.2 Mikro- und Kleingasturbinen	4
1.3 Ziele und Struktur der Arbeit	8
2 Grundlagen zur Prozessmodellierung und Optimierung	11
2.1 Vergleichsprozess der Mikrogasturbine	11
2.2 LOHC-Speichertechnologie	14
2.2.1 N-Ethylcarbazol/Perhydro-N-Ethylcarbazol	14
2.2.2 Dibenzyltoluol/Perhydro-Dibenzyltoluol	15
2.2.3 Reaktionstechnik	16
2.3 Optimierung mit genetischen Algorithmen	23
2.3.1 Analogie zur Biologie	25
2.3.2 Suchraum und Zielfunktion	27
2.3.3 Selektionsmethoden	28
2.3.4 Genetische Operatoren	29
3 Grundlagen der stickoxidarmen Verbrennung	31
3.1 Stickoxidbildung im Verbrennungsprozess	32
3.1.1 Mechanismen der Stickoxidbildung	32
3.1.2 Verdünnte Verbrennung	34
3.2 Verbrennungskonzept der zyklisch-periodischen Mischung (VZPM)	38
3.2.1 Brennkammerkonzepte für Mikrogasturbinen	39
3.2.2 Design der VZPM-Brennkammer	41
3.3 Numerische Simulation der reagierenden Brennkammerströmung	43

3.3.1	Zur Strömungsmechanik von Drallströmungen	44
3.3.2	Turbulenzmodellierung für hohe Drallzahlen	47
3.3.3	Modellierung der verdünnten Verbrennung	48
4	Prozessmodellierung und Optimierung des Gesamtsystems	53
4.1	Modellierung des Moduls Mikrogasturbine	53
4.2	Modellierung des Moduls Dehydriereinheit	56
4.3	Implementierung des Gesamtprozesses	58
4.4	Ergebnisse der Optimierung	63
5	Voruntersuchungen zur verdünnten Verbrennung in der VZPM-Brennkammer	69
5.1	Experimenteller Aufbau	69
5.1.1	Experimenteller Aufbau der VZPM-Brennkammer	70
5.1.2	Steuerung, Messtechnik und Messdatenerfassung	74
5.2	Experimentelle Ergebnisse der VZPM-Brennkammer	76
5.3	Reaktornetzwerkmodellierung der verdünnten Verbrennung	78
5.4	Strömungsfeld (CFD) der VZPM-Brennkammer	80
5.4.1	Validierung der Simulation	82
5.4.2	Reaktives Strömungsfeld für Erdgas und Wasserstoff	85
6	Gestuftes Brennkammerkonzept mit verdünnter Verbrennung	91
6.1	Aufbau der Brennkammer	91
6.2	Untersuchung der Stufung mit numerischer Strömungssimulation	94
6.3	Experimentelle Untersuchungen	99
6.3.1	Messung der Stickoxidemissionen für Erdgas	100
6.3.2	Verhalten an der mageren Verlöschgrenze im Erdgasbetrieb	100
6.3.3	Messung der Stickoxidemissionen für Wasserstoff	102
6.4	Transfer der Ergebnisse auf die Nennbedingungen der Mikrogasturbine	104
7	Zusammenfassung	109
A	Weitere Ergebnisse der Simulation	113
	Abbildungsverzeichnis	119

Tabellenverzeichnis	125
Literaturverzeichnis	127

INHALTSVERZEICHNIS

Symbolverzeichnis

Lateinische Buchstaben

A	Fläche	m^2
\bar{c}_p	Isobare spezifische Wärmekapazität	$J/(kg\ K)$
c	Konzentration	mol/m^3
\check{c}	Chromosom	—
\dot{C}	Wärmekapazitätsstrom	kW/K
\dot{C}_c	Wärmekapazitätsstrom der Abgasseite	kW/K
\dot{C}_h	Wärmekapazitätsstrom der Frischgasseite	kW/K
C_{D1}	Modellierungskonstante EDC-Modell	—
C_{D2}	Modellierungskonstante EDC-Modell	—
D_{eff}	Effektiver Diffusionskoeffizient	m^2/s
C_γ	Modellierungskonstante EDC-Modell	—
C_τ	Modellierungskonstante EDC-Modell	—
E_A	Aktivierungsenergie	kJ/mol
f_A	Passiver Skalar zur Markierung des Gases aus Stufe A	—
fit	Fitnessfunktion	—
h_{ein}	Spezifische Enthalpie am Einlass	J/kg
h_{aus}	Spezifische Enthalpie am Auslass	J/kg
ΔH_R^0	Standardreaktionsenthalpie	kJ/mol
$\Delta \bar{H}_R$	Mittlere Reaktionsenthalpie	kJ/mol
$H_{u,Br}$	Heizwert Brennstoff	kJ/kg
k	Geschwindigkeitskonstante	$m^3/(mol\ s)$
k	Turbulente kinetische Energie	m^2/s^2
k_0	Stoßfaktor	$1/s$

SYMBOLVERZEICHNIS

K_v	Rezirkulationsrate	—
L	Länge des Rohrreaktors	m
\dot{m}	Massenstrom	g/s
\dot{m}^*	Massenaustauschrate im EDC-Modell	1/s
\dot{m}_{AG}	Abgasmassenstrom	g/s
\dot{m}_{aus}	Ausströmender Massenstrom	g/s
\dot{m}_{BP}	Bypassmassenstrom	g/s
$\dot{m}_{Br,R}$	Freigesetzter Brennstoffmassenstrom im Reaktor	g/s
\dot{m}_{Br}	Brennstoffmassenstrom	g/s
\dot{m}_{CH_4}	Erdgasmassenstrom	g/s
\dot{m}_{ein}	Zuströmender Massenstrom	g/s
\dot{m}_{H_2}	Wasserstoffmassenstrom	g/s
\dot{m}_L	Luftmassenstrom	g/s
\dot{m}_{LOHC}	LOHC-Massenstrom	g/s
\dot{m}_{re}	Rezirkulierter Massenstrom	g/s
\dot{n}_{aus}	Molenstrom am Auslass	mol/s
\dot{n}_{Diff}	Molenstrom durch Diffusion	mol/s
\dot{n}_{ein}	Molenstrom am Einlass	mol/s
\dot{n}_{reakt}	Reagierender Molenstrom	mol/s
p	Druck	bar
P_{el}	Elektrische Leistung	kW
P	Straffunktion	—
\dot{Q}	Wärmestrom	kW
\dot{Q}_{aus}	Wärmestrom am Auslass	kW
\dot{Q}_{ein}	Wärmestrom am Einlass	kW
\dot{Q}_{max}	Maximal übertragbarer Wärmestrom	kW
\dot{Q}_V	Verlustwärmestrom	kW
\dot{Q}_{WL}	Wärmestrom durch Wärmeleitung	kW
\dot{Q}_{zu}	Zugeführte thermische Leistung	kW
r_{LOHC}	Reaktionsgeschwindigkeit LOHC	mol/(s m ³)
r_A	Reaktionsgeschwindigkeit der Komponente A	mol/(s m ³)
r	Radius	m
r^*	Entdimensionierter Radius	—
R	Universelle Gaskonstante	J/(mol K)

R_{Fenster}	Radius Fenster Brennkammer	mm
R_{BK}	Radius Brennkammer innen	mm
R_{Ref}	Referenzradius	m
s_l	laminare Flammgeschwindigkeit	m/s
S	Drallzahl	—
S_{iso}	Isotherme Drallzahl	—
S_m	Mittlere Drallzahl	—
\tilde{S}	Suchraum	—
t	Zeit	s
T	Temperatur	K
ΔT	Temperaturhub während der Verbrennung	K
T_{ad}	Adiabate Flammentemperatur	K
ΔT_{ad}	Adiabate Temperaturerhöhung	K
T_{BK}	Temperatur im Brennraum	K
T_{Br}	Brennstofftemperatur	K
T_c	Temperatur Einlass Wärmeübertrager (kalt)	K
T'_c	Temperatur Auslass Wärmeübertrager (kalt)	K
T_h	Temperatur Einlass Wärmeübertrager (heiß)	K
T'_h	Temperatur Auslass Wärmeübertrager (heiß)	K
T_{Reakt}	Reaktandentemperatur	K
T_{ref}	Referenztemperatur	K
T_{R}	Reaktortemperatur	K
T_{SZ}	Selbstzündtemperatur	K
T_v	Vorwärmtemperatur	K
u	Geschwindigkeit	m/s
\bar{u}_{inj}	Mittlere Austrittsgeschwindigkeit am Injektor	m/s
\bar{u}_{rad}	Mittlere Radialgeschwindigkeit	m/s
\bar{u}_x	Mittlere Axialgeschwindigkeit	m/s
\bar{u}_φ	Mittlere Tangentialgeschwindigkeit	m/s
U	Wärmedurchgangszahl	W/(m ² K)
\dot{V}	Volumenstrom	m ³ /s
V	Volumen	m ³
V_{R}	Reaktorvolumen	m ³
X	Umsatz	—

Y_i	Speziesmassenbruch (nicht reagierend)	—
Y_i^*	Speziesmassenbruch (reagierend)	—

Griechische Buchstaben

β	Gewichtung der Fitnesssterme	—
γ	Volumenbezogener Wasserstoffgehalt im Brennstoff	—
γ^*	Längenanteil EDC-Modell	—
Γ_∞	Gesamtzirkulation	1/s
ε	Wärmeübertragerwirkungsgrad	—
ε	Turbulente Dissipationsrate	m^2/s^3
ζ_{BP}	Bypassverhältnis	—
η_{BK}	Brennkammerwirkungsgrad	—
η_{el}	Elektrischer Wirkungsgrad	—
η_{pol}	Polytroper Wirkungsgrad	—
$\eta_{\text{pol,T}}$	Polytroper Wirkungsgrad der Turbine	—
$\eta_{\text{pol,V}}$	Polytroper Wirkungsgrad des Verdichters	—
ϑ	Entdimensionierte Temperatur	—
κ	Isentropenexponent	—
λ	Luftzahl	—
λ_{eff}	Effektive Wärmeleitfähigkeit	$\text{W}/(\text{mK})$
ν	Stöchiometrischer Koeffizient	—
ν^*	Kinematische Viskosität	m^2/s
ρ	Dichte	kg/m^3
σ_x	Standardabweichung vom Mittelwert	—
τ	Verweilzeit	s
τ^*	Zeitmaß EDC-Modell	s
τ_{SZ}	Zündverzugszeit	s
ψ	Gesamtwirkungsgrad des Systems MGT-DE	—
$\dot{\omega}$	Chemischer Quellterm	$\text{kg}/(\text{m}^3 \text{s})$

Tiefgestellte Indices

0	Initialer Zustand
φ	Zylinderkoordinate in tangentialer Richtung
a	Zustand a
ad	Adiabat
A	Stufe A
aus	Zustand am Auslass
b	Zustand b
B	Stufe B
BK	Brennkammer
Br	Brennstoff
c	Frischgasseite des Rekuperators
ein	Zustand am Einlass
h	Abgasseite des Rekuperators
i	Fortlaufender Index
inj	Schnitt durch die Injektorebene
iso	Isotherm
j	Fortlaufender Index
min	Minimum
max	Maximum
M	Anzahl der Reaktionen
rad	Zylinderkoordinate in radialer Richtung
x	Kartesische Koordinate x oder Polarkoordinate x
y	Kartesische Koordinate y
z	Kartesische Koordinate z

Abkürzungen

12HNEC	Perhydro-N-Ethylcarbazol
18HDBT	Perhydro-Dibenzyltoluol
A	Stufe A
AG	Abgas
AGK	Abgaskanal

SYMBOLVERZEICHNIS

B	Stufe B
BP	Bypass
BR	Batch Reactor
cRIO	Compact Reconfigurable Input/Output
CDC	Colorless Distributed Combustion
CFD	Computational Fluid Dynamics
CHP	Combined Heat and Power
CSTR	Constant Stirred Tank Reactor
DBT	Dibenzyltoluol
DE	Dehydriereinheit
EDC	Eddy Dissipation Concept
FLOX [®]	Flameless Oxidation
FLS	Flächensprung
HiTAC	High Temperature Air Combustion
HiTeCo	High Temperature Combustion
LOHC	Liquid Organic Hydrogen Carrier
MGT	Mikrogasturbine
MILD	Moderate or Intense Low-Oxygen Dilution
NEC	N-Ethylcarbazol
PFR	Plug Flow Reactor
PIV	Particle Image Velocimetry
RZ	Reaktionszone
RSM	Reynolds Stress Model
SUS	Stochastic Universal Sampling
VZPM	Verbrennungskonzept der zyklisch-periodischen Mischung
WVMI	Wirbelvormischinjektor

1 Einleitung

Im Rahmen der Energiewende soll der Übergang von der Nutzung fossiler Energieträger zu einer nachhaltigen Energiegewinnung mittels erneuerbarer Energien ermöglicht werden. Dafür muss einerseits die nominelle Kapazität der Technologien zur Energiegewinnung ausreichen, um den Energiebedarf aus regenerativen Quellen zu decken, und andererseits das Problem der Differenz zwischen Angebot und tatsächlichem Bedarf an erneuerbaren Energien gelöst werden. Für eine funktionierende Energiewirtschaft auf Basis regenerativer Energiequellen sind daher auch immer Speichertechnologien nötig, die diese Differenz ausgleichen. Da Wasserstoff eine sehr hohe Energiedichte besitzt, besteht ein möglicher Ansatz darin, bei einem Überangebot an regenerativer Energie durch Elektrolyse Wasserstoff zu erzeugen. Der Wasserstoff wird dazu in geeigneten Wasserstoffspeichermedien gespeichert und zu gegebener Zeit am Ort der Erzeugung oder an einem anderen Ort zur Energierückgewinnung eingesetzt.

1.1 Speicherung von Wasserstoff

Die Speicherung von Wasserstoff kann nach Crabtree [29] und Bowman und Klebanoff [16] mit physikalischen und chemischen Methoden erfolgen (siehe Tabelle 1.1). Zu den physikalischen Methoden zählt die Speicherung von reinem Wasserstoff bei hohem Druck oder bei niedriger Temperatur. Die Freisetzung aus dem Speicher ist vergleichsweise wenig aufwendig, da der Wasserstoff sofort in Reinform wieder verfügbar ist. Gleichzeitig ist dies ein wesentlicher Nachteil, da durch die weiten Zündgrenzen von Wasserstoff von 4 vol% bis 75 vol% im Vergleich zu Erdgas das Risiko erhöht ist, dass sich beim Kontakt mit Sauerstoff unerwünscht brennbare Gemische bilden. Der reine Wasserstoff darf daher zu keiner Zeit unkontrolliert in Kontakt mit Sauerstoff kommen, um eine Ver-

Tabelle 1.1: Übersicht über eine Auswahl verschiedener Wasserstoffspeichertechnologien nach [16].

	Methoden	Merkmale
Physikalisch	Druckbehälter ($p > 300 \text{ bar}$)	
	Kryogen ($T < 33 \text{ K}$)	<ul style="list-style-type: none"> - Reiner Wasserstoff - Großer Sicherheitsaufwand
Chemisch	Metallhydride	<ul style="list-style-type: none"> - Einlagerung im Metallgitter
	Amminboran	<ul style="list-style-type: none"> - Nebenprodukte der Freisetzungsreaktion giftig - Hohe Speicherdichte
	Adsorption	<ul style="list-style-type: none"> - Kryotechnik notwendig - Geringe Speicherdichte - Einfache Freisetzung
	LOHC	<ul style="list-style-type: none"> - Hohes Temperaturniveau für Freisetzung - Infrastruktur vorhanden

brennungsreaktion auszuschließen. Außerdem sind die Energieverluste bei der physikalischen Speicherung zu beachten. Verantwortlich für Verluste sind vor allem bei der Kompression die geringe Dichte des Wasserstoffs und bei der Verflüssigung die niedrige kritische Temperatur von 33 K [29, 55].

Die chemischen Methoden umfassen beispielsweise die Einspeicherung in Metallhydriden (Feststoffen) oder flüssigen organischen Trägersubstanzen. Chemische Speichermedien bieten den Vorteil, dass der Wasserstoff gebunden ist und so die Sicherheit beim Transport oder der Lagerung wesentlich einfacher gewährleistet werden kann, da durch die stabile chemische Verbindung das Risiko der ungewollten Reaktion beim Kontakt mit Sauerstoff auf ein Minimum reduziert wird.

In Metallhydriden wie zum Beispiel Aluminiumhydrid AlH_3 (hohe Speicherdichte) oder Lanthannickelhydrid LaNi_5H_6 (gute Freisetzungseigenschaften) wird der Wasserstoff interstitiell im Metallgitter eingelagert. Speicherdichte und Freisetzungseigenschaften verhalten sich dabei indirekt proportional zueinander

[16]. Ebenfalls zu den Speichermedien aus der Gruppe der Feststoffe zählt das Amminboran (H_3NBH_3), das eine sehr hohe Speicherdichte von 19,6 wt% bietet. Allerdings bereiten hier Zerfallsprodukte wegen ihrer Toxizität sowie die Rezyklierbarkeit noch Probleme [104]. Adsorptionsmaterialien zeichnen sich durch ihre hohe Oberfläche an der der Wasserstoff angelagert wird und ihre Porosität aus. Im Vergleich zur Einlagerung ins Metallgitter sind hier die van-der-Waals-Kräfte geringer, womit der Energieaufwand der Freisetzung ebenfalls kleiner ist. Allerdings sind bei Verwendung dieser Materialien die nötigen Umgebungsbedingungen für eine stabile Lagerung weit ungünstiger. Man kann das Maximum der Speicherdichte von 5,0 wt% bis 7,5 wt% nur bei Temperaturen im Bereich von 77 K und Drücken zwischen 50 bar bis 150 bar erreichen [116].

Flüssige zyklische Kohlenwasserstoffe aus der Gruppe der Olefine oder Aromaten werden in der Anwendung als Wasserstoffspeicher unter dem Begriff *Liquid Organic Hydrogen Carrier* (LOHC) zusammengefasst. Zu diesen Systemen zählen die Paare (dehydriert/hydriert) Benzol/Cyclohexan, Toluol/Methylcyclohexan, Naphthalin/Decalin, N-Ethylcarbazol/Perhydro-N-Ethylcarbazol oder Dibenzyltoluol/Perhydro-Dibenzyltoluol. Allen LOHC gemein ist, dass für die Dehydrierung von LOHC das höchste Temperaturniveau von mindestens 473 K im Vergleich zu allen zuvor genannten chemischen Speichermedien benötigt wird, da sonst die katalytische Freisetzungsreaktion nicht aufrechterhalten werden kann [65, 92]. Allerdings bieten LOHC aus prozesstechnischer Sicht den großen Vorteil, dass sie in flüssiger Form vorliegen. LOHC können deshalb mit einer ähnlichen Infrastruktur wie die gängigen Kraftstoffe Benzin und Diesel gelagert und verteilt werden.

Der Ablauf eines Speicherzyklus für LOHC ist in Abbildung 1.1 schematisch dargestellt. Der Wasserstoff wird durch Elektrolyse gewonnen und in einer exothermen Reaktion an die Trägersubstanz gebunden. Das hydrierte LOHC kann so beispielsweise gelagert oder transportiert werden. Um den gespeicherten Wasserstoff in elektrische Energie umzuwandeln, muss er vorher in einem endothermen Deyhdriervorgang freigesetzt werden. Für die Energieumwandlung können Brennstoffzellen, Wasserstoffmotoren oder Gasturbinen verwendet werden. Da sich diese Speichertechnologie auch für die Umsetzung einer dezentralen Energieversorgung eignet, ist auch die Energieumwandlung in kleineren Gasturbinen,

sogenannten Mikrogasturbinen, von Interesse. Im Kontext mit dezentraler Energieversorgung wurde den Mikrogasturbinen ab den 1990er Jahren eine zunehmend größere Bedeutung zuerkannt [45, 128].

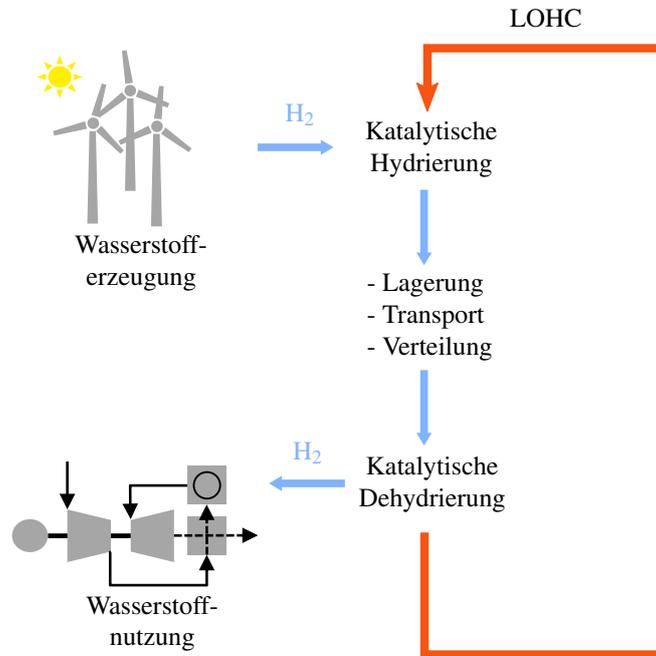


Abbildung 1.1: Speicherzyklus von Wasserstoff in LOHC.

1.2 Mikro- und Kleingasturbinen

Als Mikro- und Kleingasturbinen werden Gasturbinen in einem elektrischen Leistungsbereich von 30 kW bis 250 kW bezeichnet [69]. Erste Forschungsprojekte im Bereich der Mikrogasturbinen wurden bereits 1970 durchgeführt [34]. Tabelle 1.2 zeigt einen Auszug aus Datenblättern aktuell kommerziell erhältlicher Mikrogasturbinenmodelle [52]. Mikrogasturbinen zeichnen sich durch ihre einfache Bauweise aus: Der Generator, der einstufige Verdichter und die einstufige Turbine sitzen auf einer Welle, wodurch sie einfacher gefertigt und gewartet werden können. Die Drehzahlen der Turbine liegen im Bereich von 30000 rpm bis 120000 rpm [34]. Allerdings ist durch das geringere Druckverhältnis zwischen 3,5 und 5 der elektrische Wirkungsgrad von 30 % geringer als bei großen Gasturbinen und kann in dieser Höhe nur durch eine inne-

Tabelle 1.2: Kommerziell erhältliche Mikrogasturbinen und deren Kennzahlen nach [25, 26, 37, 39].

		Capstone C30	Capstone C60	Elliot TA100	Turbec T100
Elektrische Leistung	P_{el} in kW	31	62	100	100
Thermische Leistung	\dot{Q}_{zu} in kW	127	214	362	333
Druck in der Brennkammer	p_3 in bar	3,6	4,8	4,0	4,5
Globale Luftzahl	λ	6,3	7,2	6,1	6,9
Abgastemperatur	T_6 in K	548	578	566	543
Abgasmassenstrom	\dot{m}_L in g/s	313	480	814	800
Elektrischer Wirkungsgrad	η_{el}	0,24	0,29	0,28	0,30

re Wärmerekuperation erreicht werden. Ohne Rekuperation liegt der Wirkungsgrad von Mikrogasturbinen etwa 10 % niedriger als in Tabelle 1.2 angegeben. Durch die Wärmeübertragung innerhalb des Prozesses ist die Brennkammer-eintrittstemperatur höher als im nicht rekuperierten Prozess großer Gasturbinen, sie liegt bei ca. 873 K. Die hohen globalen Luftzahlen der Mikrogasturbinen ermöglichen die Nutzung des großen Abgasenthalpiestroms im sogenannten *Combined Heat and Power* (CHP) Modus, der zur Warmwassererzeugung dient.

Dieser Abgasenthalpiestrom kann insbesondere auch dazu genutzt werden, die Energie für die endotherme Freisetzungsreaktion der Dehydrierung von LOHC zur Verfügung zu stellen. Das nötige Temperaturniveau von mindestens 473 K liegt im Bereich der Abgastemperatur T_6 der Mikrogasturbinen (siehe Tabelle 1.2). Abbildung 1.2 zeigt schematisch die Stoffflüsse zwischen Mikrogasturbine (MGT) und Dehydriereinheit (DE) bei einer entsprechenden Kopplung. Für die Kopplung sind zwei grundlegende Punkte zu beachten. Zum einen muss mit dem Abgasenthalpiestrom ausreichend thermische Leistung in Form von Wasserstoff für den Nennlastbetrieb der Mikrogasturbine freigesetzt werden können. Zum anderen muss der Wasserstoff sicher und schadstoffarm in der Brennkammer der Mikrogasturbine verbrannt werden.

Gängige Mikrogasturbinenmodelle werden in der Regel mit Erdgas betrieben. Die Verbrennungseigenschaften von Wasserstoff gegenüber Erdgas sind im Vergleich deutlich herausfordernder hinsichtlich Betriebssicherheit und Schadstoffbildung während des Verbrennungsprozesses. Die Zündgrenzen von Erdgas sind

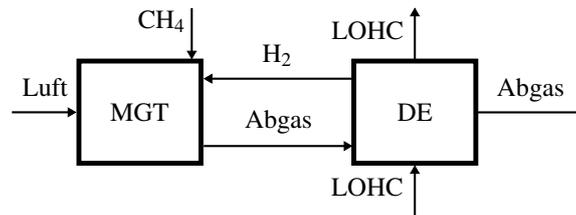


Abbildung 1.2: Schema der Stoffflüsse zwischen Mikrogasturbine (MGT) und Dehydriereinheit (DE).

mit einem Bereich von 4,4 vol% bis 16,6 vol% deutlich enger als die von Wasserstoff. Der Temperaturbereich, in dem Selbstzündung von Wasserstoff auftritt, beginnt bei 1 bar ab 752 K, bei Erdgas hingegen erst ab ca. 800 K [73, 97]. Hinzu kommt, dass durch die interne Wärmerückgewinnung die Brennkammereintrittstemperatur der Frischluft bereits über der Selbstzündtemperatur von Wasserstoff und Erdgas liegt. Die Reaktionsgeschwindigkeit der Erdgasverbrennung ist jedoch langsamer als die der Wasserstoffverbrennung.

Abbildung 1.3 zeigt die Unterschiede in der Zündverzugszeit für Erdgas und Wasserstoff in Abhängigkeit von der Gemischtemperatur T_M berechnet mit . Die Zündverzugszeit von Wasserstoff ist um mindestens eine Größenordnung geringer als die von Erdgas. Die laminaren Flammgeschwindigkeiten für unterschiedliche Gemischzusammensetzungen mit konstanter Vorwärmtemperatur $T_V = 894$ K bei Umgebungsbedingungen sind in Abbildung 1.4 dargestellt. Die Flammgeschwindigkeiten sind auf die Flammgeschwindigkeit eines Gemisches mit einer adiabaten Flammentemperatur $T_{ad} = 2464$ K für Erdgas normiert (entspricht der stöchiometrischen Mischung, $\lambda = 1$). Die laminaren Flammgeschwindigkeiten von Wasserstoff sind um den Faktor 2,5 bis 4,5 größer. Die Zündverzugszeit und die laminare Flammgeschwindigkeit wurden mit Cantera mit den Mechanismen GRI 3.0 [45] (Erdgas) und \dot{O} Conaire [85] (Wasserstoff) berechnet.

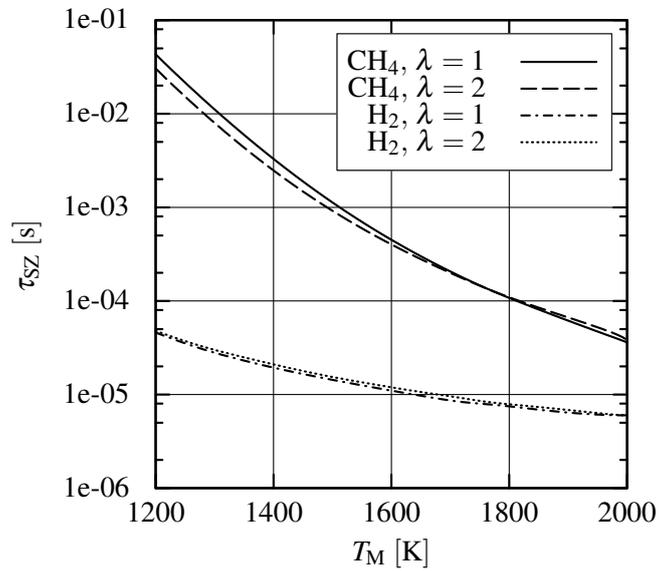


Abbildung 1.3: Zündverzugszeiten τ_{SZ} für Erdgas und Wasserstoff berechnet für Luftzahlen $\lambda = 1$ und $\lambda = 2$, aufgetragen über die Gemischttemperatur.

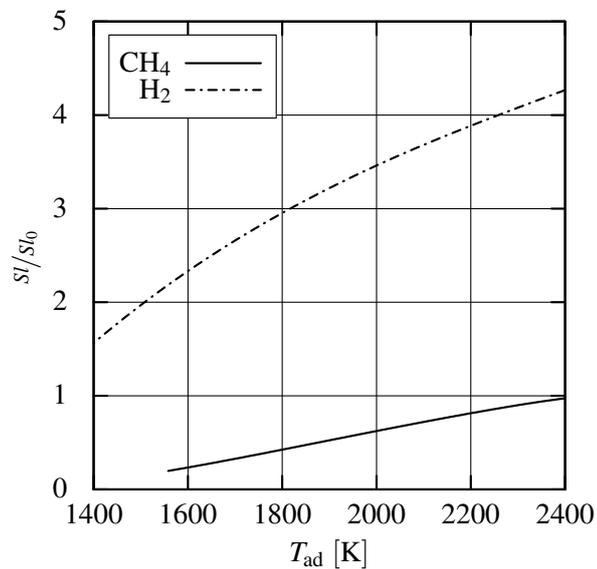


Abbildung 1.4: Normierte laminare Flammgeschwindigkeit $s_1/s_{1,0}$ für Erdgas und Wasserstoff in Abhängigkeit von der adiabaten Flammentemperatur des Betriebspunktes bei Umgebungsbedingungen.

1.3 Ziele und Struktur der Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist es, ein Brennkammerkonzept für eine Mikrogasturbine zu entwickeln, so dass die MGT für die Kopplung mit einem LOHC-Speicherzyklus eingesetzt werden kann. Dabei soll die Abgasenthalpie für den Dehydrierprozess genutzt werden. Da die Dehydriereinheit erst nach einer bestimmten Aufwärmphase Wasserstoff freisetzen kann, muss vorher die Brennkammer der Mikrogasturbine auch mit Erdgas betrieben werden können.

Für diese Arbeit werden exemplarisch die Parameter der Turbec T100 für den Gasturbinenprozess verwendet, da dafür aus der Arbeit von Zimmermann [139] Modelle und Validierungsdaten vorhanden sind. Die Kopplung der Mikrogasturbine mit einem LOHC-Zyklus wird jeweils für die Paarungen N-Ethylcarbazol/Perhydro-N-Ethylcarbazol (NEC/12HNEC) und Dibenzyltoluol/Perhydro-Dibenzyltoluol (DBT/18HDBT) untersucht. Für die Umsetzung des Brennkammerkonzepts wird dabei auf ein sub-ppm-Verbrennungskonzept für Erdgas [20] zurückgegriffen, das nach einer Adaptation auch für Wasserstoff NO_x -Werte im Bereich von maximal 1 ppm bis 2 ppm normiert auf 15 % O_2 liefern soll.

Die theoretischen Grundlagen für diese Arbeit sind in zwei Kapitel aufgeteilt. Ein Überblick über die Grundlagen zur Prozessmodellierung und Optimierung des Systems Mikrogasturbine (MGT) - Dehydriereinheit (DE) wird in Kapitel 2 gegeben. Kapitel 3 fasst die Theorie für die stickoxidarme Verbrennung von Wasserstoff und Erdgas zusammen. Ebenfalls werden an dieser Stelle die Grundlagen zur numerischen Simulation eines reagierenden Strömungsfeldes mit hoher Drallzahl gezeigt

Um die Betriebsbedingungen der Brennkammer im Nennlastfall im Fall der Kopplung zu ermitteln, wird zuerst das Gesamtsystem, bestehend aus Mikrogasturbine (MGT) und Dehydriereinheit (DE), in Kapitel 4 untersucht. Basierend auf Energiebilanzen wird das System MGT-DE modelliert und hinsichtlich des Gesamtwirkungsgrades optimiert. Für die Optimierung werden genetische Algorithmen verwendet. Aus der Optimierung ergeben sich die Betriebspunkte für

die Mikrogasturbine, wenn sie in den LOHC-Speicherzyklus integriert werden soll.

Kapitel 5 zeigt zunächst den Versuchsaufbau sowie Validierungsexperimente des gewählten Verbrennungskonzeptes mit Erdgas und Wasserstoff. Da optische Untersuchungen für ein tiefergehendes Verständnis des Strömungsfeldes in der Brennkammer im Experiment nur schwer möglich sind, werden in diesem Kapitel numerische Modelle in Form eines Reaktornetzwerkmodells und numerischer Strömungssimulation vorgestellt und validiert.

Das entwickelte Brennkammerkonzept für den Betrieb der MGT mit Wasserstoff und Erdgas wird in Kapitel 6 gezeigt. Es wird die Betriebscharakteristik hinsichtlich Stabilität und Stickoxidemissionen sowohl numerisch als auch experimentell unter Umgebungsbedingungen untersucht. Die Ergebnisse werden im letzten Abschnitt dieses Kapitels auf die Nennbedingungen der Mikrogasturbine übertragen und bewertet.

Abschließend fasst Kapitel 7 die gewonnenen Erkenntnisse zusammen.

2 Grundlagen zur Prozessmodellierung und Optimierung

Das in Kapitel 1 beschriebene System Mikrogasturbine und Dehydriereinheit wird modelliert und mit genetischen Algorithmen optimiert. Dieses Kapitel befasst sich mit den Grundlagen des Mikrogasturbinenprozesses und der LOHC-Speichertechnologie sowie mit der angewendeten Optimierungstechnik, den genetischen Algorithmen.

2.1 Vergleichsprozess der Mikrogasturbine

Um die Prozesse in der Gasturbine im Modell abzubilden, wird bei der Mehrzahl der Gasturbinen der offene Joule-Brayton-Prozess verwendet. Abbildung 2.1 zeigt die Prozessschritte eines offenen Gasturbinenprozesses:

- 1 → 2: Polytrope Kompression im Verdichter
- 2 → 3: Isobare Wärmezufuhr in der Brennkammer
- 3 → 4: Polytrope Expansion in der Turbine

Grundsätzlich werden für die gezeigte Modellierung in Kapitel 4 kinetische und potentielle Energien vernachlässigt. Außerdem wird angenommen, dass sich alle Gase ideal verhalten.

Es gilt für die polytrope Kompression von 1 → 2

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa} \frac{1}{\eta_{pol,V}}} . \quad (2.1)$$

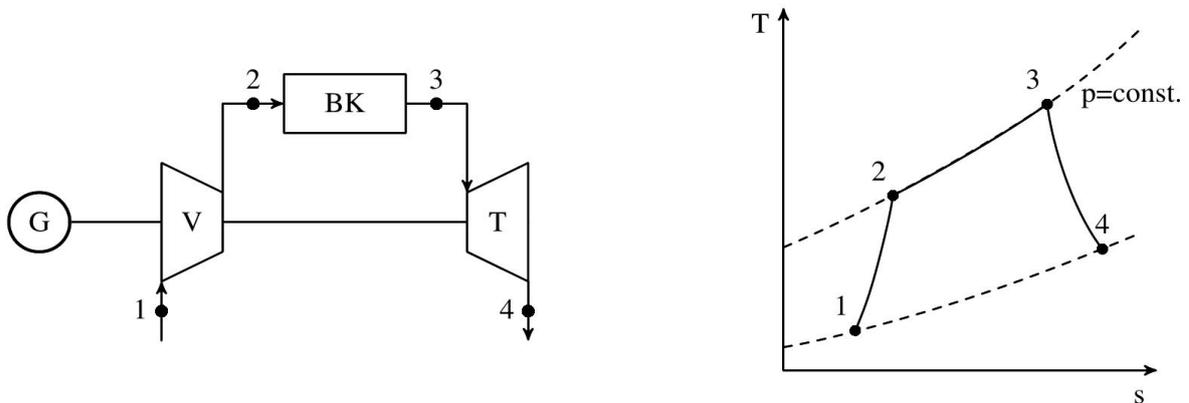


Abbildung 2.1: Prozessschema und T-s Diagramm eines offenen Gasturbinenprozesses.

Diese Gleichung beschreibt die Temperaturerhöhung in Abhängigkeit der Drücke der Zustände 1 und 2.

Analog zu Gleichung (2.1) wird die polytrope Expansion von Zustand 3 → 4 beschrieben [18,69].

$$\frac{T_4}{T_3} = \left(\frac{p_4}{p_3} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa} \frac{1}{\eta_{pol,T}}} \quad (2.2)$$

Unter der Annahme eines stationären Systems leitet sich die Formulierung für die isobare Wärmezufuhr von 2 → 3 in Abbildung 2.1 aus der Bilanz der zugeführten (ein) und abgeführten (aus) Enthalpieströme ab [95]:

$$0 = \dot{Q}_{zu} + \sum_{ein} \dot{m}_{ein} h_{ein} - \sum_{aus} \dot{m}_{aus} h_{aus} \quad (2.3)$$

Um die innere Rekuperation der Wärme bei Mikrogasturbinen zu berücksichtigen, wird der Vergleichsprozess um zwei Prozessschritte erweitert (vgl. Abbildung 2.2):

- 1 → 2: Polytrope Kompression im Verdichter
- 2 → 3: Isobare Wärmezufuhr im Rekuperator
- 3 → 4: Isobare Wärmezufuhr in der Brennkammer
- 4 → 5: Polytrope Expansion in der Turbine
- 5 → 6: Isobare Wärmeabfuhr im Rekuperator

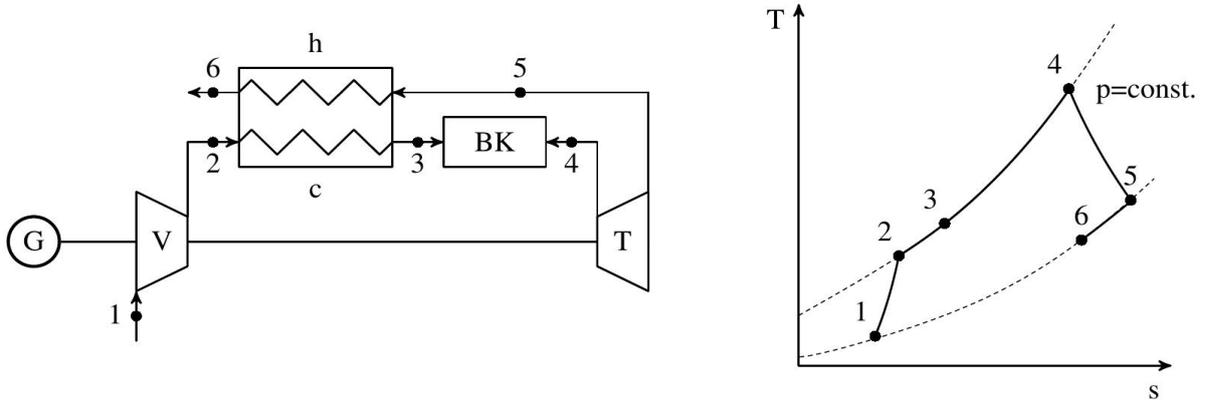


Abbildung 2.2: Prozessschema und T-s Diagramm eines offenen rekuperierten Gasturbinenprozesses.

Die intern übertragene Wärmemenge ist abhängig vom Wärmeübertragerwirkungsgrad ε

$$\varepsilon = \frac{\dot{Q}}{\dot{Q}_{max}} = \frac{\dot{C}_c(T'_c - T_c)}{\dot{C}_{min}(T_h - T_c)}. \quad (2.4)$$

Dabei ist \dot{C}_{min} das Minimum der Wärmekapazitätsströme

$$\dot{C}_i = \dot{m}_i \bar{c}_{p,i} \quad (2.5)$$

von \dot{C}_h ($h = \text{heiß}$, $5 \rightarrow 6$) und \dot{C}_c ($c = \text{kalt}$, $2 \rightarrow 3$). T'_i bezeichnet jeweils die Temperatur am Austritt.

Die Abgastemperatur T'_h kann durch einen Bypass um den Rekuperator auf der heißen Seite angepasst werden. Das Bypassverhältnis ζ_{BP} beschreibt das Verhältnis des Massenstroms durch den Bypass \dot{m}_{BP} zum gesamten Abgasmassenstrom $\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$:

$$\zeta_{BP} = \frac{\dot{m}_{BP}}{\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}}. \quad (2.6)$$

Die Modellierung des Wärmeübergangs mit Rekuperatorbypass nach Ibrahim et al. [58] beruht auf der Annahme eines Gegenstrom-Wärmeübertragers, der mit vollentwickelter laminarer Strömung durchströmt wird. Dadurch bleibt das Produkt aus Wärmedurchgangszahl U und der Wärmeübertragerfläche A konstant. Dieses wird experimentell bestimmt und in die Gleichung

$$\ln \left(\frac{T'_h - T_c}{T_h - T'_c} \right) = UA \left(\frac{1}{\dot{C}_c} - \frac{1}{\dot{C}_h} \right) \quad (2.7)$$

eingesetzt [9, 44, 58]. Zu berücksichtigen ist, dass der Wärmekapazitätsstrom \dot{C}_h dabei abhängig vom gewählten Bypassmassenstrom ist. Da der übertragbare Wärmestrom im Rekuperator durch den Bypass sinkt, wird auch der elektrische Wirkungsgrad durch diese Maßnahme verschlechtert.

2.2 LOHC-Speichertechnologie

Für die Modellierung der Dehydriereinheit werden zunächst die physikochemischen Eigenschaften mit Fokus auf den Dehydriervorgang der Trägermoleküle N-Ethylcarbazol/Perhydro-N-Ethylcarbazol (NEC/12HNEC) und Dibenzyltoluol/Perhydro-Dibenzyltoluol (DBT/18HDBT) exemplarisch erläutert. Das LOHC NEC wird aufgrund seiner günstigen Freisetzungseigenschaften und DBT wegen seiner hohen Speicherdichte und guten Thermostabilität untersucht. Um die Dehydrierung mathematisch darzustellen, werden anschließend die Grundlagen der Reaktionstechnik erklärt.

2.2.1 N-Ethylcarbazol/Perhydro-N-Ethylcarbazol

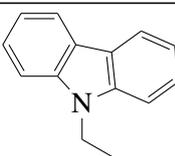
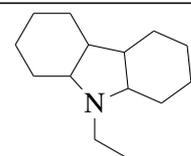
Das N-Ethylcarbazol-Molekül besteht im Wesentlichen aus zwei Benzolringen, die durch einen 5-Ring verbunden werden (vgl. Tabelle 2.1). Die Anzahl der Doppelbindungen gibt gleichzeitig auch die Anzahl der Wasserstoffmoleküle an, die durch die Hydrierung in der Trägersubstanz gespeichert werden können. Somit ergibt sich eine Speicherkapazität von 6 Wasserstoffmolekülen, was bezogen auf das gesamte Trägermolekül 5,8 wt% entspricht. Die globale Reaktionsgleichung für das LOHC-System NEC/12HNEC lautet:



Die Paarung NEC/12HNEC ist das einzige Trägermolekül der bereits erwähnten LOHC, deren zyklische Verbindung auch ein Stickstoffatom enthält. Durch das Einbringen des Stickstoffatoms im 5-Ring des Moleküls (vgl. Strukturformel abgebildet in Tabelle 2.1) wird die Reaktionsenthalpie für die Freisetzung abgesenkt. NEC gilt als attraktives Trägermedium, weil für die Freisetzung des

hydrierten Wasserstoffs im Vergleich zu anderen homozyklischen Aromaten weniger Energie für die endotherme Freisetzungsreaktion nötig ist. Das Stickstoffatom schwächt auch gleichzeitig die Bindungen in der Substanz, somit treten abhängig von Katalysator und Temperatur mehr oder weniger starke Dealkylierungsaktivitäten auf. Dies führt zur Zersetzung des Moleküls und macht es für die Wiederverwendung als Wasserstoffspeicher unbrauchbar [29, 81, 92]. Preuster [92] und Preuster et al. [93] geben des Weiteren einen Überblick über bereits untersuchte Katalysatoren und Temperaturbereiche für den Dehydriervorgang an. Es werden meist Edelmetallkatalysatoren, Platin, Ruthenium oder Rhodium auf Aluminiumoxid für Dehydriertemperaturen von 130 °C bis 270 °C verwendet [92, 132, 133]. Größter Nachteil ist der hohe Schmelzpunkt der dehydrierten Substanz von 68 °C. Dies bedeutet aus prozesstechnischer Sicht eine große Herausforderung, da das System zusätzlich immer geheizt werden muss, um eine Kristallisation von NEC zu verhindern. Die für die Modellierung relevanten stofflichen Eigenschaften sind in Tabelle 2.1 zusammengefasst.

Tabelle 2.1: Stoffdaten der Paarung N-Ethylcarbazol/Perhydro-N-Ethylcarbazol [19, 82, 92, 121].

	N-Ethylcarbazol NEC	Perhydro-N-Ethylcarbazol 12HNEC
		
Speicherkapazität		5,8 wt%
Schmelzpunkt	68 °C	< 20 °C
Siedepunkt bei Normaldruck	270 °C	≈280 °C
Reaktionsenthalpie der Dehydrierung		50-55 kJ/mol _{H₂}
Dehydriertemperatur bei 1 bar		130-270 °C

2.2.2 Dibenzyltoluol/Perhydro-Dibenzyltoluol

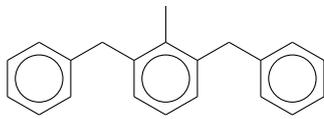
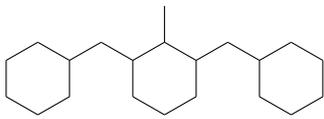
Eine neuere Trägersubstanz aus der Gruppe der LOHC-Moleküle ist Dibenzyltoluol. Es handelt sich um ein Isomerengemisch, das ursprünglich als Wärmeträgeröl entwickelt wurde. Diese Substanz zeichnet sich durch ihre ver-

gleichsweise hohe Speicherkapazität aus. Insgesamt können 9 H₂-Moleküle gespeichert werden. Die globale Reaktion ergibt sich zu



Im Vergleich zur Dehydrierung von 12HNEC wird mehr Energie benötigt, um den Wasserstoff wieder freizusetzen. Die dafür angegebenen Werte aus der Literatur für DBT befinden sich im Bereich zwischen 65 kJ/mol_{H₂} and 71 kJ/mol_{H₂} [19, 82]. Zwei große Vorteile dieser Substanz sind der niedrige Schmelzpunkt sowie die hohe Thermostabilität, weswegen sie sich sehr gut für den Einsatz als LOHC eignet. Tabelle 2.2 gibt einen Überblick über die wichtigsten Eigenschaften von DBT [19, 82, 92, 93]. Da es sich um ein Isomerengemisch handelt, stellt die gezeigte Strukturformel auch nur eine der möglichen Konfigurationen dar.

Tabelle 2.2: Stoffdaten der Paarung Dibenzyltoluol/Perhydro-Dibenzyltoluol [19, 82, 92, 93].

	Dibenzyltoluol DBT	Perhydro-Dibenzyltoluol 18HDBT
		
Speicherkapazität		6,2 wt%
Schmelzpunkt	-39 °C bis -34 °C	-45
Siedepunkt bei Normaldruck	390 °C	370
Reaktionsenthalpie der Dehydrierung		65-71 kJ/mol _{H₂}
Dehydriertemperatur bei 1 bar		≈ 300 °C

2.2.3 Reaktionstechnik

Um den Dehydriervorgang im Reaktionsvolumen zu modellieren, benötigt man eine mathematische Formulierung für die Art der gewählten Reaktorformen sowie für die Reaktionskinetik der beteiligten Spezies. Die nächsten Abschnitte zeigen für Rohr- und Rührkesselreaktor die wesentlichen Gleichungen. Der Rohrreaktor wird in Kapitel 4 zur Modellierung des Dehydrierreaktors verwendet. Der Rührkesselreaktor wird im Rahmen der Verbrennungsuntersuchung zur

Modellierung der Emissionen in den Kapiteln 5 und 6 eingesetzt und wird deshalb an dieser Stelle eingeführt. Abschließend wird im Rahmen der Reaktionskinetik der formalkinetische Ansatz erläutert, mit dessen Hilfe die zeitliche Abhängigkeit des Dehydriervorgangs im Modell beschrieben wird.

Idealisierte Reaktorformen spielen in der Reaktionstechnik eine wichtige Rolle, da sich aus den Basisformen, dem Rührkesselreaktor und dem Rohrreaktor, die drei wichtigsten idealisierten ReaktorbaufORMen ableiten lassen: der diskontinuierliche Rührkessel (*batch reactor*, BR), der kontinuierliche Durchflussrührkessel (*continuous operated stirred tank reactor*, CSTR) und der kontinuierliche Rohrreaktor (*plug flow reactor*, PFR). Aus diesen Reaktorformen kann man durch Zusammenschalten einzelner Formen auch komplexere Reaktoraufbauten simulieren. Mathematisch lässt sich jeder idealisierte Reaktor mit der allgemeinen Stofferhaltungs- und Energieerhaltungsgleichung beschreiben [38]. Abbildung 2.3 zeigt beispielhaft einen Bilanzraum. In einem einpha-

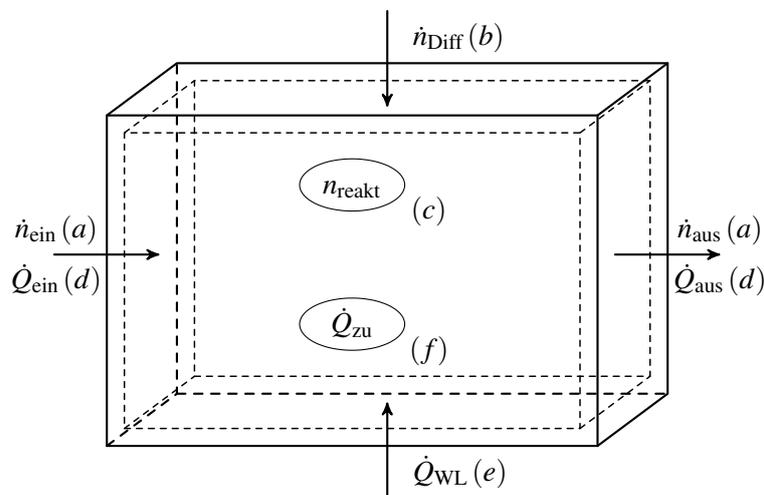


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des Bilanzraumes mit der entsprechenden Kennzeichnung der Terme der Gleichung (2.10) und Gleichung (2.12).

sigen System setzt sich die zeitliche Änderung der Molmenge n_i aus einem (a) Konvektions-, (b) Diffusions- und (c) Quellterm zusammen (vgl. Gleichung (2.10)). Im kartesischen Koordinatensystem gilt somit für die Stoffbilanz:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{dV} \frac{\partial n_i}{\partial t} &= -\operatorname{div}(c_i \cdot \vec{u}) \quad (\text{a}) \\
 &+ \operatorname{div}(\mathbf{D}_{\text{eff}} \cdot \operatorname{grad} c_i) \quad (\text{b}) \\
 &+ \sum_{j=1}^M v_{i,j} r_j \quad (\text{c}).
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Dabei sind die Koeffizienten der Matrix

$$\mathbf{D}_{\text{eff}} = \begin{bmatrix} D_{\text{eff},x} & 0 & 0 \\ 0 & D_{\text{eff},y} & 0 \\ 0 & 0 & D_{\text{eff},z} \end{bmatrix} \tag{2.11}$$

effektive Diffusionskoeffizienten, das heißt, neben ihrer Stoffeigenschaft hängen sie auch noch von der Art der Strömung, dem Turbulenzgrad und dem Konzentrationsgradienten zur Hauptströmungsrichtung ab. Den Quellterm bilden die Anzahl der Reaktionen $j = 1 \dots M$ mit dem jeweils zugehörigen Produkt aus stöchiometrischem Koeffizienten v_j und Reaktionsgeschwindigkeit r_j [38]. Die Variable c_i bezeichnet die Konzentration der Komponenten i und \vec{u} den Geschwindigkeitsvektor.

Analog zur Stoffbilanz wird die Energiebilanz formuliert. Die zeitliche Änderung der Energie besteht für das betrachtete System aus Abbildung 2.3 aus einem (d) Konvektions-, einem (e) Wärmeleitungs- und einem (f) Quellterm:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{dV} \frac{\partial E_{\text{sys}}}{\partial t} &= -\operatorname{div}(\rho \bar{c}_p T \cdot \vec{u}) \quad (\text{d}) \\
 &+ \operatorname{div}(\lambda_{\text{eff}} \cdot \operatorname{grad} T) \quad (\text{e}) \\
 &+ \sum_{j=1}^M r_j \cdot (-\Delta H_{R,j}^0) \quad (\text{f})
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

mit

$$\lambda_{\text{eff}} = \begin{bmatrix} \lambda_{\text{eff},x} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{\text{eff},y} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{\text{eff},z} \end{bmatrix}. \tag{2.13}$$

Auch hier sind die Koeffizienten λ_{eff} effektive Wärmeleitfähigkeiten und neben ihrer Stoffeigenschaften von den denselben Faktoren abhängig wie die oben genannten effektiven Diffusionskoeffizienten [38]. Der Quellterm (f) besteht aus der Summe der Produkte aus Reaktionsgeschwindigkeit r_j und der Reaktionsenthalpie $\Delta H_{R,j}^0$ der einzelnen Reaktionen.

Kontinuierlicher Rohrreaktor

Rohrreaktoren werden in axialer Richtung kontinuierlich durchströmt. Die Annahme, dass Temperatur und Konzentration konstant sind, gilt hier lediglich in radialer Richtung, da vollständige Vermischung in axialer Richtung ausgeschlossen wird. Daher gilt für die Konzentration c_i

$$c_i(t, x, y, z) = c(t, z) \quad (2.14)$$

und für die Temperatur T

$$T(t, x, y, z) = T(t, z). \quad (2.15)$$

Abbildung 2.4 zeigt die Konzentrationsverläufe in Abhängigkeit von der Zeit und der Rohrlänge [10, 38].

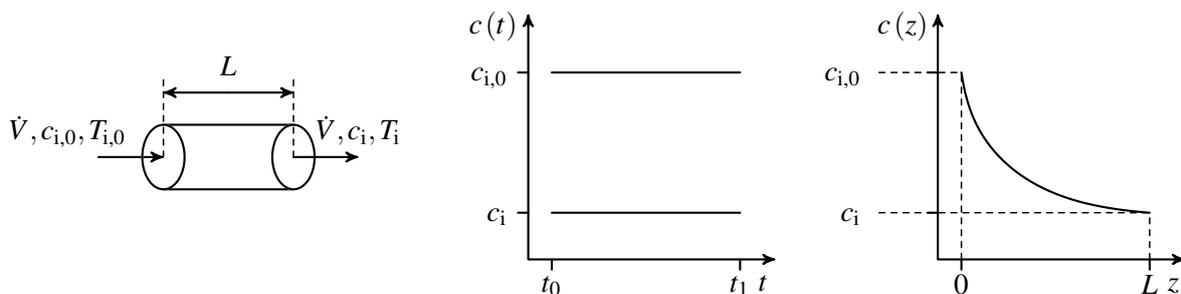


Abbildung 2.4: Skizze eines kontinuierlich durchströmten Rohrreaktors und der dazugehörige Verlauf der Konzentration in Abhängigkeit von Zeit und Ort.

Mit den Annahmen „zeitliche Stationarität“ und „keine Diffusion in axialer Richtung“, vereinfacht sich die Stoffbilanz aus Gleichung (2.10) zu

$$-\frac{dn_i}{dV} + \sum_{j=1}^M \nu_{i,j} r_j = 0. \quad (2.16)$$

Aus der vereinfachten Stoffbilanz kann nun eine Formulierung für die Verweilzeit im Rohrreaktor bestimmt werden. Gleichung (2.16) wird dafür für eine einzige stöchiometrisch unabhängige Reaktion für die Komponente A in der Form



angewendet. Die Definition des Umsatzes X_A lautet

$$X_A = \frac{\dot{n}_{A,0} - \dot{n}_A}{\dot{n}_{A,0}}. \quad (2.18)$$

Zusammen mit Gleichung (2.16) ergibt sich für die Komponente A

$$\frac{dX_A}{dV} = \frac{-r_A}{\dot{V}_0 \cdot c_{A,0}}. \quad (2.19)$$

Die Verweilzeit im Reaktor

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}_0}, \quad (2.20)$$

die benötigt wird, um einen bestimmten Umsatz X der Komponente zu erreichen, kann durch Integration von Gleichung (2.19) bestimmt werden:

$$\tau = c_{A,0} \int_0^X \frac{dX_A}{-r_A}. \quad (2.21)$$

Kontinuierlicher Durchflussrührkessel

In idealen Rührkesselreaktoren werden die Reaktanten bei Eintritt in den Bilanzraum sofort vollständig vermischt. Bei der kontinuierlichen Betriebsweise des Reaktors (CSTR) werden mit gleichem Mengenstrom Edukte und Produkte zu- bzw. abgeführt. Es existieren entlang der drei Raumrichtungen keinerlei Konzentrationsgradienten und auch keine Temperaturgradienten. Die Eduktkonzentration nimmt sprunghaft die Produktkonzentration bei Eintritt in den Bilanzraum an (vgl. Abbildung 2.5). Dadurch, dass in keiner der drei Raumrichtungen x , y und z Konzentrations- und Temperaturgradienten herrschen, reduzieren sich die Variablen von Konzentration und Temperatur zu

$$c(t, x, y, z) = c(t) \quad (2.22)$$

und

$$T(t, x, y, z) = T(t). \quad (2.23)$$

Mit der Annahme (2.22) und unter Berücksichtigung der Stoffströme über die Systemgrenze für den kontinuierlichen Betrieb vereinfacht sich die allgemeine Stoffbilanz (2.10) zu

$$\frac{dn_i}{dt} = \dot{V}_0 c_{i,0} - \dot{V} c_i + V \sum_{j=1}^M v_{i,j} r_j \quad (2.24)$$

und analog die Energiebilanz zu

$$\frac{dE_{sys}}{dt} = \dot{m} \Delta h + \dot{Q}_{WL} + V \sum_{j=1}^M r_j \cdot (-\Delta_R H_j). \quad (2.25)$$

Für den CSTR gilt neben der Annahme der zeitlichen auch die der örtlichen Stationarität. In Abbildung 2.5 ist zum Vergleich der Konzentrationsverlauf des diskontinuierlich betriebenen Rührkesselreaktors (BR) dargestellt. Da der zu- und abgeführte Volumenstrom während der Reaktion gleich null ist, kann die Konzentration nicht mehr zeitlich stationär betrachtet werden [10, 38].

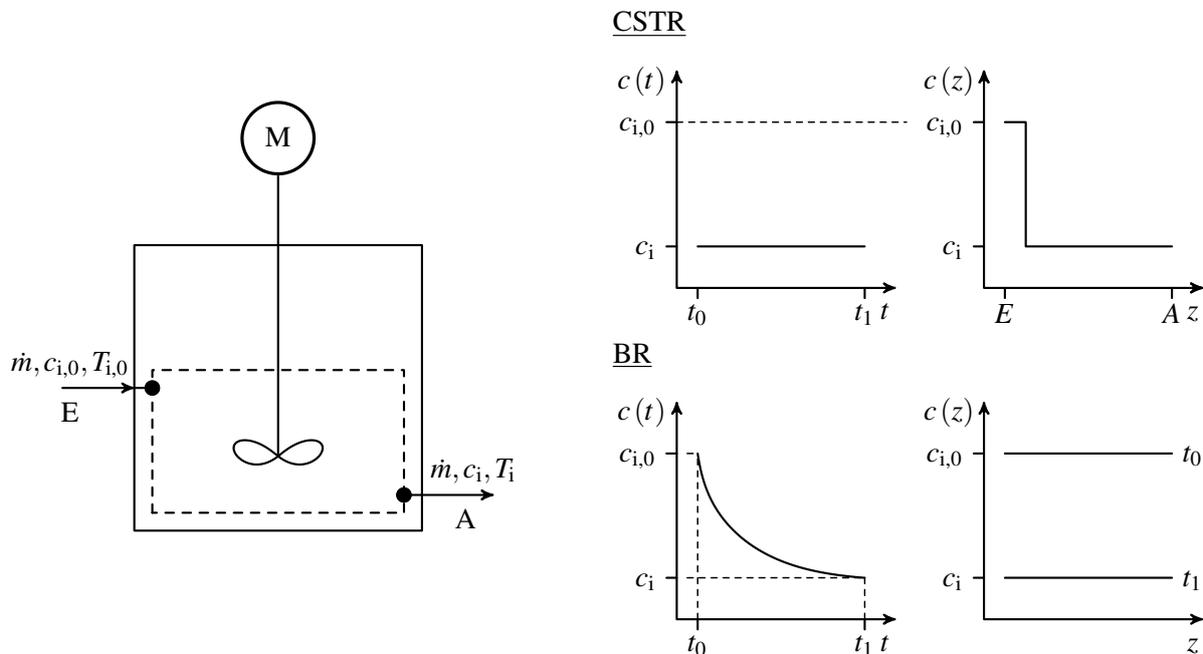


Abbildung 2.5: Skizze eines Rührkesselreaktors und der Vergleich der Konzentrationsverläufe im kontinuierlichen und diskontinuierlichen Betrieb.

Temperaturführung in idealisierten Reaktoren

Die Formulierung der Konvektions- und Wärmeleitungsterme der Gleichung (2.12) hängt auch von der Temperaturführung ab. Bei der adiabaten Reaktionsführung gilt $\dot{Q}_{WL} = 0$, da neben dem konvektiven Term Wärme weder zuzunehmen noch abgeführt wird. Ist der Wärmestrom \dot{Q}_{WL} allerdings klein genug, kann dieser vernachlässigt werden und die Annahme der Adiabasie ist gerechtfertigt. Für die isotherme Führung wird angenommen, dass die Eintrittstemperatur gleich der Austrittstemperatur ist. Somit gilt $\Delta h \approx 0$. In der Realität liegt in der Regel eine polytrope Reaktionsführung vor. In diesem Fall kann die Enthalpiebilanz nicht weiter vereinfacht werden, sondern alle drei ursprünglichen Terme, nämlich Konvektions-, Wärmeleitungs- und Quellterm, bleiben erhalten [38].

Reaktionskinetik

Die chemische Kinetik beschreibt den zeitlichen Ablauf einer Reaktion und dient zur Formulierung der Quellterme (c) und (e) aus den Gln. (2.10) und (2.12). Diese Zeitabhängigkeit ist insbesondere nötig, wenn sich die Reaktionsgeschwindigkeiten r_j zeitlich in der Größenordnung der anderen Prozesse im System wie Wärmeleitung, Strömung oder Diffusion bewegen. Läuft die Reaktion jedoch sehr schnell ab im Vergleich zu den anderen genannten Prozessen, kann die Zeitabhängigkeit vernachlässigt werden [124].

Die quantitative Beschreibung des zeitlichen Ablaufs einer Reaktion erfolgt mit Reaktionsgleichungen. Für eine einfache Reaktion der Form



ist nur eine Gleichung erforderlich. Für komplexere Systeme mit parallelen Reaktionen oder Folgereaktionen werden Mechanismen postuliert, die alle bekannten Elementargleichungen einschließen. Da die Lösung dieser Mechanismen mit erhöhtem Rechenaufwand einhergeht, können komplexe Mechanismen auf einen formalkinetischen Ansatz reduziert werden. Er vereinfacht einen komplexen Mechanismus wieder zu einer Globalreaktion, wie beispielsweise in Gleichung (2.26). Der formalkinetische Ansatz eignet sich auch für Systeme, deren Zwi-

schenprodukte nicht bekannt oder für die Betrachtung nicht von Bedeutung sind, da lediglich ein zeitlicher Zusammenhang zwischen Edukt und Produkt ermittelt werden muss. Die Reaktionsrate r_A einer Globalreaktion, wie in Gleichung (2.26) beschrieben, lässt sich mit

$$r_A = \frac{dc_A}{dt} = -k \cdot c_A^a \quad (2.27)$$

bestimmen. Für eine Dehydrierreaktion von LOHC wird nach Sotoodeh [107] ein Zeitgesetz 1. Ordnung ($a = 1$) angenommen. Die Geschwindigkeitskonstante k wird durch den Arrhenius-Ansatz

$$k = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (2.28)$$

approximiert. Die Aktivierungsenergie E_A und der Stoßfaktor k_0 werden durch Regression aus experimentellen Daten bestimmt [10]. Die Temperatur T ergibt sich bei adiabater Temperaturführung im Reaktor in Abhängigkeit von der Temperatur am Eintritt T_0 , der adiabaten Temperaturerhöhung T_{ad} und des Umsatzes X zu:

$$T = T_0 + \Delta T_{ad} X. \quad (2.29)$$

Für ΔT_{ad} gilt

$$\Delta T_{ad} = \frac{c_{A,0} (-\Delta \bar{H}_{R,A})}{\bar{\rho} \cdot \bar{c}_p}. \quad (2.30)$$

Für die mittlere Reaktionsenthalpie $\Delta \bar{H}_{R,A}$ wird über das Kirchhoffsche Gesetz die Temperaturabhängigkeit der Reaktionsenthalpie berücksichtigt [10, 38, 124].

2.3 Optimierung mit genetischen Algorithmen

Die zuvor gezeigten Grundlagen zu Bilanzierung des Systems Mikrogasturbine-Dehydrierer ermöglichen im nächsten Schritt die Suche nach dem optimalen Betriebspunkt. Der optimale Betriebspunkt ist im Rahmen dieser Arbeit immer gleichbedeutend mit dem größtmöglichen Wirkungsgrad des Gesamtsystems MGT-DE. Dieses Kapitel zeigt die Methode, die verwendet wurde, um den optimalen Punkt im stationären Betrieb zu finden.

Optimierungsprobleme werden im Allgemeinen durch ihren Suchraum \tilde{S} definiert, innerhalb dessen die Zielfunktion $f(\tilde{S})$ ausgewertet wird. Die Zielfunktion ist dabei eine mathematische Formulierung des Optimierungsproblems. Für die Suche nach der optimalen Lösung gibt es im Wesentlichen drei Methoden:

- Enumerative Methode: Im ganze Suchraum wird der Reihe nach die Zielfunktion an jeder Stelle ausgewertet. Diese Methode ist sehr rechenaufwändig.
- Analytische Methoden: Diese sind zwar effizienter als die vorher genannte Methode, allerdings sind die Voraussetzungen hierfür in den wenigsten Fällen gegeben. Zum Beispiel muss hierfür der Suchraum $\tilde{S} \subseteq \mathbb{R}^n$ und stetig differenzierbar sein. Zu den analytischen Methoden zählen gängige Verfahren wie das Gradientenverfahren oder die Optimierung nach Newton [100].
- Zufallsbasierte Methoden: Dazu zählen die verwendeten evolutionären Algorithmen. Evolutionäre Algorithmen fassen verschiedene Formen der Programmierung zusammen, die bei der Entwicklung einer Lösung für eine Fragestellung die Evolution in der Biologie zum Vorbild nehmen.

Evolutionäre Algorithmen lassen sich sehr breit anwenden und überzeugen durch ihre flexiblen Anpassungsmöglichkeiten für ein Problem, etwa durch die Gestaltung der Fitnessfunktion oder der Hybridisierung mit anderen nicht evolutionären Lösungsverfahren. Darüber hinaus eignen sie sich für Fragestellungen, über die kaum Vorwissen vorhanden ist, da ein großer Suchraum effizient durchsucht werden kann und kein Wissen über die Lage der Maxima und Minima von Nöten ist. Gleichwohl gibt es auch Nachteile: Die Lösung des Problems ist nicht deterministisch. Der Rechenaufwand kann mitunter sehr groß sein. Durch die Vielzahl an Parametern, die gesetzt werden können, ist auch die Anpassung an die Problemstellung sehr zeitintensiv [46, 84].

Genetische Algorithmen sind eine Untergruppe evolutionärer Algorithmen. Zu diesem Überbegriff zählen auch die Evolutionsstrategie und die genetische Programmierung. Unterscheidungsmerkmale der genannten Algorithmen sind ihre Eignung für verschiedene Populationsgrößen und die Auswahlmechanismen der besten Individuen für die nächste Generation [84, 125].

Aufgrund der obengenannten Vorteile dieser Algorithmen, wird das System MGT-DE mit genetischen Algorithmen untersucht. Die folgenden Abschnitte zeigen zunächst die Analogie zur Biologie und anschließend wird auf die einzelnen Schritte, die innerhalb von genetischen Algorithmen ablaufen, eingegangen. Die gewählte Syntax und die Ausdrücke orientieren sich im Wesentlichen an der Implementierung der genetischen Algorithmen in der Software MATLAB, da diese für die Auswertung der Optimierung verwendet wurde. Für die Modellierung des in dieser Arbeit betrachteten Systems, steht vor allem die Formulierung der Zielfunktion im Fokus. Die Schritte *Selektion* und *Anwendung genetischer Operatoren* sind in der verwendeten Software MATLAB implementiert.

2.3.1 Analogie zur Biologie

Die biologische Evolution bezeichnet Strategien in der Natur, die zur Bewahrung, Anpassung oder Ausbildung neuer Organismen nötig sind. Sie werden für die Programmierung evolutionärer Algorithmen zum Vorbild genommen.

Abbildung 2.6 zeigt das zentrale Element eines jeden Organismus, ein Chromosom. Ein Chromosom besteht aus Desoxyribonukleinsäure (DNS), die ihrerseits aus einzelnen Genen aufgebaut ist. Die Ausprägung eines Gens, zum Beispiel die Augenfarbe, wird als Allel bezeichnet, das an einem bestimmten Ort im DNS-Strang (Locus) zu finden ist (siehe Tabelle 2.3) [46, 125].

Betrachtet man eine Population, so steht ein gewisser Genpool zur Verfügung, der mittels Evolutionsfaktoren weiterentwickelt wird. Diese Faktoren sind [125]:

- Die *Selektion*, die durch den Fitnesswert bestimmt wird (z.B. unterschiedliche Fähigkeit, einen Geschlechtspartner zu finden).
- Die *Rekombination*, die bei der sexuellen Paarung stattfindet und durch die die Gene der Eltern neu kombiniert werden.
- Die *Mutation*, die durch Fehler bei der Rekombination entsteht.
- Der *Genfluss*, der durch die Zu- oder Abwanderung eines Lebewesens einer Population zu oder von einer anderen Population stattfindet.

- Der *Gendrift*, bei dem innerhalb kleiner Populationen einzelne Allele durch Zufall aussterben.

Ein wichtiger Bestandteil der evolutionären Algorithmen ist die mathematische Beschreibung dieser Evolutionsfaktoren, um das Optimum innerhalb einer Population zu finden.

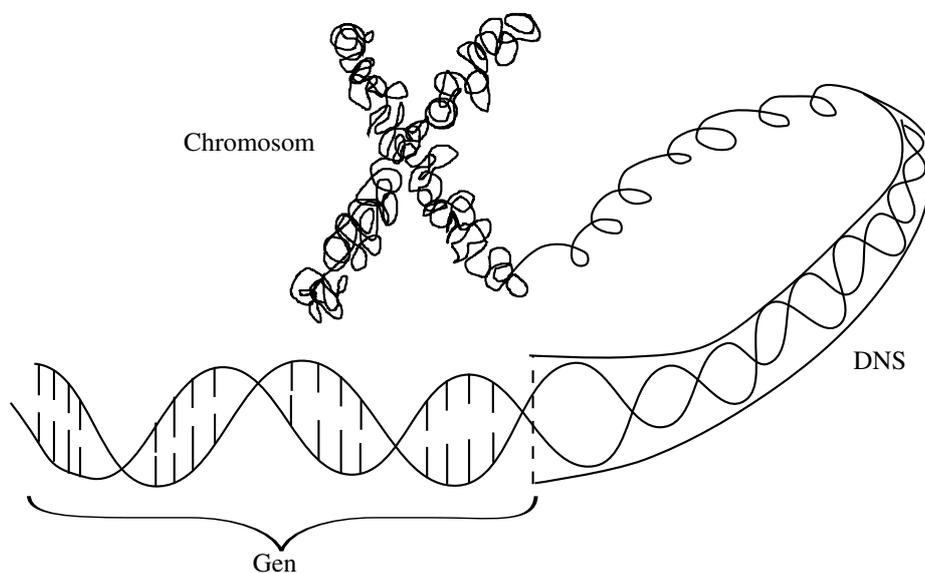


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung des Aufbaus eines Chromosoms.

Tabelle 2.3: Vergleich der wichtigsten Begriffe aus der Biologie mit denen der Algorithmen [46,96].

Begriffe	Biologie	Evolutionäre Algorithmen
Chromosom	Makromolekül; enthält Erbinformationen	String, Zeichen- oder Zahlenkette
Gen	Abschnitt des DNS-Strangs	Zeichen, Feature, Character, Variable
Allel	Zustandsform von Genen	Wert eines Zeichens
Locus	Genort eines Gens	Position eines Zeichens
Population	Menge von Organismen	Menge von Chromosomen
Generation	Population zu einem Zeitpunkt	Population zu einem Zeitpunkt
Fitness	Überlebensfähigkeit eines Organismus	Güte einer chromosom-codierten Lösung

2.3.2 Suchraum und Zielfunktion

Wie bereits eingangs erwähnt, ist der Suchraum \tilde{S} die Grundlage jedes Optimierungsproblems. Die Basis des Suchraums bilden bei genetischen Algorithmen die Chromosomen \tilde{c} , die sich aus einzelnen Genen zusammensetzen. Analog zu Tabelle 2.3 ist die Population dann Teil des Suchraums, und die Populationsgröße legt die Anzahl der Individuen pro Generation fest.

Das zweite Element eines Optimierungsproblems ist die Zielfunktion, die im Zusammenhang mit evolutionären Algorithmen als Fitnessfunktion fit bezeichnet wird. Sie ist das Abbild eines jeden Elements des Suchraums, und ihr wird in der Regel eine positive, reelle Zahl zugewiesen:

$$fit : \tilde{S} \rightarrow \mathbb{R}^+ \quad (2.31)$$

Der Fitnesswert eines Chromosoms entscheidet im nächsten Schritt, ob und wie es in die nächste Generation übernommen wird. Da der Suchraum lediglich eine Menge an Lösungen repräsentiert, müssen inkorrekte Lösungen aussortiert werden. Dies geschieht entweder über Nebenbedingungen, die nur von korrekten Lösungen erfüllt werden, oder in der Zielfunktion wird ein Bestrafungsterm (Penalty, P) eingeführt, durch den inkorrekte Lösungen schlechter bewertet werden. Somit erweitert sich der Term der ursprünglichen Zielfunktion fit zu

$$\hat{fit}(\tilde{c}) = fit(\tilde{c}) - P. \quad (2.32)$$

Die Zielfunktion muss nicht immer nur aus einem Kriterium bestehen. Für n Kriterien gibt es n Zielfunktionen, die den Suchraum abbilden. Eine gewichtete Summe der Form

$$fit(\tilde{c}) = \sum_{i=1}^n \beta_i fit_i(\tilde{c}) \quad (2.33)$$

erlaubt es, die einzelnen Funktionen für die Mehrkriterien-Optimierung entsprechend ihrer Gewichtung β_i zu einer Gesamtzielfunktion zusammenzufassen. Für die Lösung eines Mehrkriterien-Optimierungsproblems ist eine Gesamtzielfunktion aber nicht zwingend notwendig, da n Zielfunktionen einzeln für sich ausgewertet werden können. Dann kann eine sogenannte pareto-optimale Lösung gefunden werden. Eine Lösung l_0 ist dann pareto-optimal, wenn keine Lösung l innerhalb des Suchraums für die n Zielfunktionen bessere oder gleiche Werte ergibt [46].

2.3.3 Selektionsmethoden

Nachdem die Bewertung der Fitness einzelner Chromosomen einer Population möglich ist, kann damit nun die Auswahl der Chromosomen für die nächste Generation getroffen werden. Die Auswahl geschieht mit Selektionsmechanismen, die anhand unterschiedlicher Kriterien nach Bäck und Hoffmeister [8] eingeteilt werden:

- Statische oder dynamische Selektion: Anhand des Fitnesswertes wird ein Ranking für die Chromosomen erstellt. Hängt die Selektionswahrscheinlichkeit eines Chromosoms nur vom Rang ab und variiert nicht, so spricht man von einer statischen Methode. Bei dynamischen Methoden ändert sich die Wahrscheinlichkeit, dass dieses Chromosom gewählt wird, von Iteration zu Iteration.
- Diskriminierend oder nicht diskriminierend: Für Chromosomen mit schlechtem Fitnesswert kann dieser zu null gesetzt werden um die Selektionswahrscheinlichkeit für die nächste Generation zu senken.
- Eliteselektion oder reine Selektion: Wird eine bestimmte Anzahl der am besten bewerteten Chromosomen in die nächste Generation übernommen, spricht man von Eliteselektion.

Zur Veranschaulichung wird die in der vorliegenden Arbeit angewendete Selektionsmethode *Stochastic Universal Sampling* (SUS) exemplarisch gezeigt. Sie wird in der Implementierung der genetischen Algorithmen in MATLAB als Standard verwendet. Abbildung 2.7 zeigt die bildliche Darstellung der Methode. Es wird proportional zum zugehörigen Fitnesswert jedem Chromosom anteilig ein Segment auf einem Kreis zugewiesen. Eine Zufallszahl legt den Startpunkt entlang des Kreisbogens fest. Dann werden ausgehend vom Startpunkt in gleichem Abstand Zeiger über den ganzen Kreis verteilt in genau der Anzahl, die die Populationsgröße für die nächste Generation vorgibt [11]. Das dem Kreissegment zugeordnete Chromosom wird entsprechend der Anzahl der Zeiger auf das Segment in die nächste Generation übernommen. Anhand der vorher genannten Kriterien ist dies eine dynamische, nicht diskriminierende Eliteselektion [46].

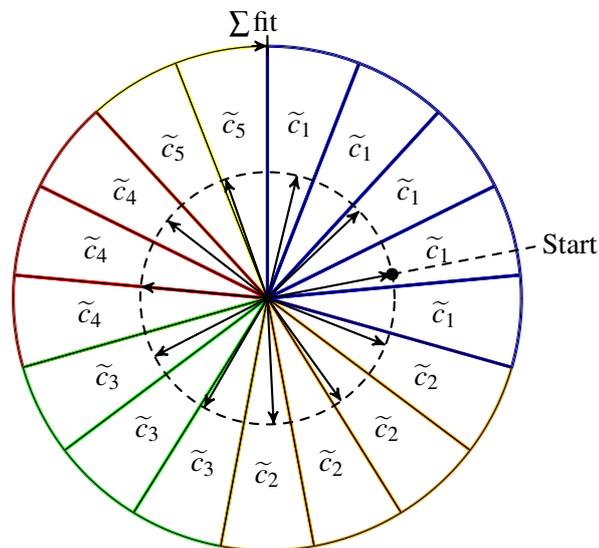


Abbildung 2.7: Schematische Darstellung der Selektionsmethode Stochastic Universal Sampling.

2.3.4 Genetische Operatoren

Die selektierten Chromosomen werden in eine neue Generation überführt. Dabei können die neuen Chromosomen aus drei verschiedenen Prozessen stammen, die die in Abschnitt 2.3.1 gezeigten Evolutionsfaktoren zum Vorbild haben (siehe Abbildung 2.8) [46, 78].

- Die Elite der Chromosomen wird unverändert übernommen. Ihre Anzahl wird anteilig an der Populationsgröße oder absolut festgelegt.
- Die Paarung (Rekombination, Cross Over) zweier Chromosomen bedeutet, dass nach einer bestimmten Vorschrift der Chromosomensatz gekreuzt wird und sich dadurch ein neues Chromosom ergibt. Dies kann mit einer Rekombination nach einer mathematischen Vorschrift geschehen oder zufallsbasiert, indem an zufälligen Loci Allele oder ganze Gene getauscht werden.
- Die Mutation verändert mit zuvor definierter Wahrscheinlichkeit an zufälligen Stellen einzelne Allele. Dadurch wird der in Abschnitt 2.3.1 erwähnte Gendrift verhindert, und es werden Chromosomen erzeugt, die möglicherweise nie Teil der Population waren.

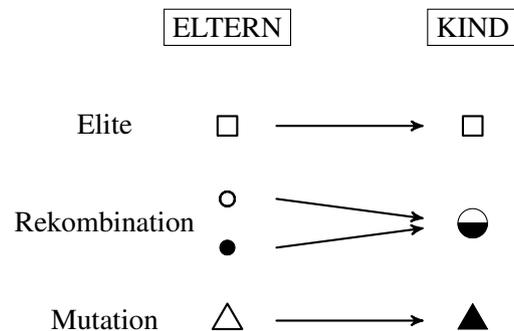


Abbildung 2.8: Überblick über die Möglichkeiten der Herkunft / Entstehung der Kindgeneration (nach [78]).

Die durch die Operatoren entstandene neue Generation wird nun im nächsten Schritt erneut mit der Fitnessfunktion bewertet. Die Abfolge *Bestimmen der Fitness - Selektion - Anwendung genetischer Operatoren* wird so lange fortgeführt, bis das Abbruchkriterium erfüllt ist und das Optimum gefunden ist.

Für die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Fragestellung bedeutet dies, dass, basierend auf den Modellen für Mikrogasturbine und Dehydriereinheit, eine Fitnessfunktion formuliert werden muss, die mit der gezeigten Abfolge ausgewertet werden kann. Aus den Ergebnissen der Optimierung lassen sich anschließend die Randbedingungen für die Untersuchung des stickoxidarmen Verbrennungskonzeptes ableiten.

3 Grundlagen der stickoxidarmen Verbrennung

Die im Rahmen dieser Arbeit betrachtete Mikrogasturbine T100 ist für den Betrieb mit Erdgas ausgelegt. Für den Betrieb mit Wasserstoff aus der Dehydrierung muss deshalb das Verbrennungskonzept angepasst werden. Die Herausforderung besteht dabei darin, die verbrennungstechnischen Eigenschaften von Erdgas und Wasserstoff - höhere adiabate Flammentemperaturen, kürzere Zündverzugszeiten und niedrigere Selbstzündtemperatur im Vergleich zu Erdgas - in einem Verbrennungskonzept zu vereinen, mit dem beide Brennstoffe genutzt werden können und trotzdem wenig Stickoxide erzeugt werden.

Ein vielversprechender Ansatz zur Stickoxidreduzierung ist die verdünnte Verbrennung (*Diluted Combustion*). Ursprünglich stammt die Methode aus der Industriefernungstechnik, sie wird aber auch für die Gasturbinenanwendung untersucht [63, 75, 80, 131]. Der Ansatz zeichnet sich durch das große Potential zur Reduktion der NO_x -Emissionen von bis zu 70 % aus [118], was durch die intensive Vermischung des Frischgases mit Inertgasen erreicht wird. Anwendung findet die verdünnte Verbrennung auch im Verbrennungskonzept der zyklisch-periodischen Mischung (VZPM) nach Brückner-Kalb [20]. Dieses zeichnet sich durch eine starke Drallströmung in der Brennkammer aus, wodurch die starke Verdünnung mit Abgasen erreicht wird. Die VZPM-Brennkammer wird in dieser Arbeit sowohl experimentell als auch numerisch untersucht, um eine geeignete Konfiguration für die Verbrennung von Wasserstoff und Erdgas zu finden.

3.1 Stickoxidbildung im Verbrennungsprozess

Um Stickoxidemissionen reduzieren zu können, ist das Verständnis ihrer Entstehung nötig. Stickoxide (NO_x) umfassen alle gasförmigen Oxide von Stickstoff. Für die Verbrennung relevant sind dabei die Oxide NO und NO_2 [120]. Abhängig von den Umgebungsbedingungen bilden sich während des Verbrennungsprozesses Stickoxide auf unterschiedlichen chemischen Pfaden. .

3.1.1 Mechanismen der Stickoxidbildung

Erweiterter Zeldovich-Mechanismus

Zeldovich [136] postulierte den Bildungsmechanismus, bestehend aus den Elementargleichungen (3.1) und (3.2). Zusammen mit Gleichung (3.3) spricht man auch vom erweiterten Zeldovich-Mechanismus [120]:



Aufgrund der hohen Aktivierungsenergie von 318 kJ/mol, die benötigt wird, um die Dreifachbindung des N_2 -Moleküls aufzubrechen, ist dieser Pfad vor allem für Temperaturen $> 1600 \text{ K}$ relevant [124, 130], daher auch die Bezeichnung *thermisches NO*. Des Weiteren wird über diesen Mechanismus das NO im Vergleich zum Brennstoffoxidationsprozess relativ langsam gebildet [120].

Fenimore-Mechanismus

Die NO -Bildung nach Fenimore ist mit dem CH -Radikal verbunden, das sich bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen bildet. Deshalb ist dieser Pfad nur für die Erdgasverbrennung relevant. Ausgehend davon, dass das CH -Radikal das N_2 -Molekül spaltet



und sich Wasserstoffcyanid und Stickstoff als Zwischenprodukte bilden, reagieren diese über weitere Zwischenschritte zu NO (siehe auch [120, 124]). Fenimore [41] zeigt auch, dass sich NO über diesen Pfad wesentlich schneller bildet als thermisches NO. Deshalb wird in der Literatur für diesen Mechanismus auch der Name *promptes NO* verwendet. Es bildet sich auch schon bei Temperaturen um die 1000 K, deswegen ist für diesen Mechanismus weniger das Temperaturniveau maßgebend, sondern die Luftzahl des Gemisches. Insbesondere bei fetten Gemischen ist der Anteil an promptem NO relevant [124].

Distickstoffoxid-Mechanismus

Durch die termolekulare Reaktion



bildet sich Distickstoffoxid (Lachgas), das mit einem freien weiteren Sauerstoffatom zu 2 NO-Molekülen weiterreagieren kann. Durch die niedrige Aktivierungsenergie und die Dreistoß-Reaktion ist dieser Pfad besonders bei hohem Druck und niedrigen Temperaturen von Bedeutung [28, 120].

NNH-Mechanismus

Ein weiterer Pfad der NO-Bildung geschieht über den Weg, den Bozelli und Dean [17] vorschlagen:



Der Mechanismus benötigt hohe Temperaturen und hohe Radikalkonzentrationen, um zur NO-Bildung beizutragen. Diese Bedingungen liegen direkt innerhalb der Reaktionszone vor, dort trägt dieser signifikant zur Gesamtmenge der Stickoxide bei [54].

Stickstoffdioxid-Mechanismus

NO₂ bildet sich aus NO und dem Radikal HO₂



wenn NO in einen Bereich mit hoher HO₂-Konzentration gelangt. Dies ist in Gebieten mit vergleichsweise niedriger Temperatur der Fall. In Regionen mit hoher Temperatur wird NO₂ durch die Reaktion mit einem Wasserstoffatom oder einem Sauerstoffatom wieder zu NO umgewandelt.

Bei der technischen Umsetzung von Maßnahmen zur Schadstoffreduktion spricht man von primären Maßnahmen, die die NO_x-Bildung während der Verbrennung verhindern, und von sekundären Maßnahmen, die NO_x im Abgas nach dem Verbrennungsprozess durch einen Katalysator reduzieren. Aus den Randbedingungen der Mechanismen lassen sich Grundregeln für primäre Maßnahmen ableiten [20]. Ein wirksames Konzept muss eine hohe globale Luftzahl zulassen, so dass adiabate Flammentemperaturen kleiner 1600 K erzielt werden. Gebiete mit lokal fetten Gemischen müssen durch geeignete Vormischung des Brennstoff-Luft-Gemisches oder Vermischung mit Inertgasen verhindert werden, da in diesen Zonen Temperaturspitzen entstehen, die die NO_x-Bildung begünstigen.

3.1.2 Verdünnte Verbrennung

Das Verbrennungsregime der verdünnten Verbrennung taucht in der Literatur unter folgenden Begriffen auf: Flameless Combustion, FLOX[®] (*Flameless Oxidation*), MILD (*Moderate or Intense Low-Oxygen Dilution*), CDC (*Colorless Distributed Combustion*) oder HiTAC (*High Temperature Air Combustion*) [7, 27, 50, 64, 129, 130].

Aus diesen Begriffen gehen die wichtigsten Merkmale der verdünnten Verbrennung hervor. Um eine ausreichende Mischungsgüte zu erreichen, wird der Frischgasstrom mit hohem Impuls in die Brennkammer eingebracht [72]. Durch die starke Verdünnung des Frischgases mit quasi-inertem Abgas (*diluted*) werden die Reaktanden durch das heiße Abgas vorgewärmt und die Reaktionszone

vergrößert sich. Idealerweise verteilt sie sich über das gesamte Reaktionsvolumen (*distributed*). Die Verdünnung erhöht die chemischen Zeitskalen, so dass diese größer werden als die turbulenten Skalen. Für diesen Fall kann das Verhalten annähernd mit einem kontinuierlichen Durchflussrührkessel (CSTR) modelliert werden [59, 89]. Für die Verbrennung in der Brennkammer bedeutet dieses Verhalten konkret, dass Temperaturgradienten innerhalb der Reaktionszone geringer werden. Die Stickoxidbildung kann so effektiv gehemmt werden, da einerseits Zonen mit fetten Gemischen durch die Verdünnung verringert werden und andererseits wegen der gleichmäßigen Temperaturverteilung weniger lokale Temperaturspitzen auftreten.

Abhängig vom Brennstoff, von der Sauerstoffkonzentration und vom Verdünnungsgas ändert sich das emittierte Farbspektrum der Flamme, unter Umständen ist die Flammenfront im konventionellen Sinn nicht mehr mit bloßem Auge erkennbar (*flameless, colorless*) [49]. Das lässt sich auf zwei Gründe zurückführen. Zum einen ist durch die verteilte Reaktionszone die lokale Intensität im Vergleich zu einer konventionellen Flamme mit gleichen Randbedingungen geringer. Zum anderen ist das emittierte Spektrum der Radikale CH und C₂ temperaturabhängig [27].

Da die verdünnte Verbrennung mit einer Vielzahl an Begriffen in der Literatur auftaucht, wird in den nachfolgenden Abschnitten ein kurzer Überblick über deren Definition gegeben.

Flameless Oxidation (FLOX[®])

Um den Bereich der verdünnten Verbrennung zu definieren, wird bei Wüning [130] ein Stabilitätsdiagramm abhängig von der Temperatur im Brennraum T_{BK} und der Rezirkulationsrate K_v angegeben. Der verwendete Brenner ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Brennstoff und Oxidator werden nicht vorgemischt mit hohem Impuls in die Brennkammer eingebracht. Die Rezirkulationsrate ergibt sich aus dem Verhältnis des rezirkulierten Anteils des Abgasmassenstroms \dot{m}_{re} in die Reaktionszone und des gesamten Frischgasmassenstroms:

$$K_v = \frac{\dot{m}_{re}}{\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}} \quad (3.9)$$

Abbildung 3.2 zeigt schematisch ein Stabilitätsdiagramm. Es ist in vier Bereiche aufgeteilt: Unterhalb der Selbstzündgrenze und nur für sehr kleine Rezirkulationsraten kann im Bereich A, der konventionellen Flamme, Brennstoff oxidiert werden. Das Regime der verdünnten Verbrennung (C) wird im untersuchten Bereich von einem Übergangsbereich (B), in dem die Flamme nicht stabil ist, umgeben. Region C wird erst bei ausreichend hohen Temperaturen und großen Rezirkulationsraten erreicht. Für Erdgas finden sich in der Literatur Werte von mindestens $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ und Rezirkulationsraten von $K_v > 2,5$, um den Bereich der verdünnten Verbrennung zu erreichen [36, 72, 130]. Villani et al. [122] erstellten ein Stabilitätsdiagramm für die verdünnte Verbrennung von Wasserstoff, das zeigt, dass ab $600\text{ }^{\circ}\text{C}$ und $K_v > 5,0$ das Regime erreicht wird. Villani führt einen Grenzwert für die NO_x -Emissionen bei $10,0\text{ ppm}$ normiert auf $15\% \text{O}_2$ ein, um experimentell auf ein Stabilitätsdiagramm wie in Abbildung 3.2 zu kommen.

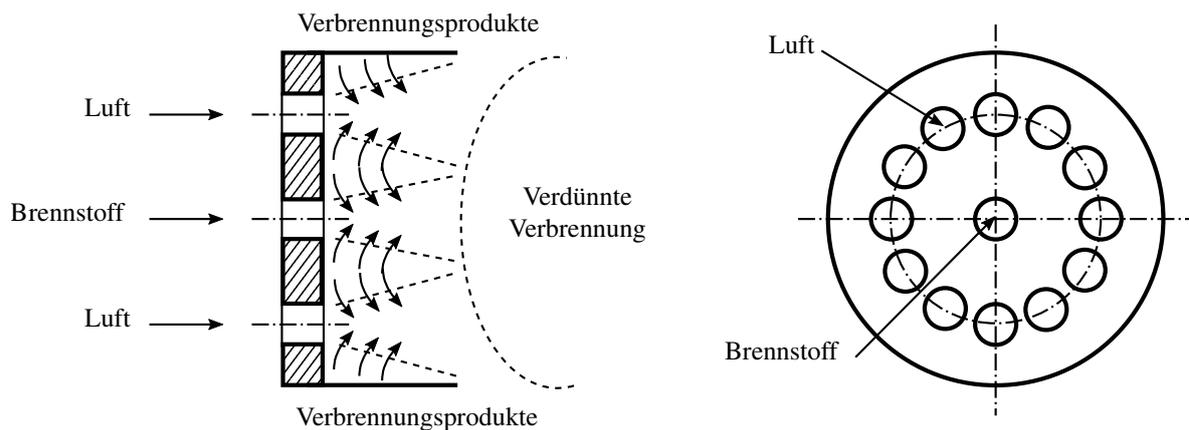


Abbildung 3.1: Skizze des Brenners nach Wüning [130].

Moderate or Intense Low-Oxygen Dilution (MILD)

Ein anderer Ansatz für die Abgrenzung der verdünnten Verbrennung vom Regime der konventionellen Flamme ist die Evaluierung des Temperaturhubs während des Verbrennungsprozesses. Für die verdünnte Verbrennung nach der Definition der MILD-Verbrennung müssen nach Cavaliere und de Joannon [27] die Reaktandentemperatur T_{Reakt} , die Selbstzündtemperatur T_{SZ} und der Temperaturhub ΔT im Verbrennungsprozess betrachtet werden: „Ein Verbrennungsprozess wird als MILD bezeichnet, wenn die Temperatur der Reaktanden höher

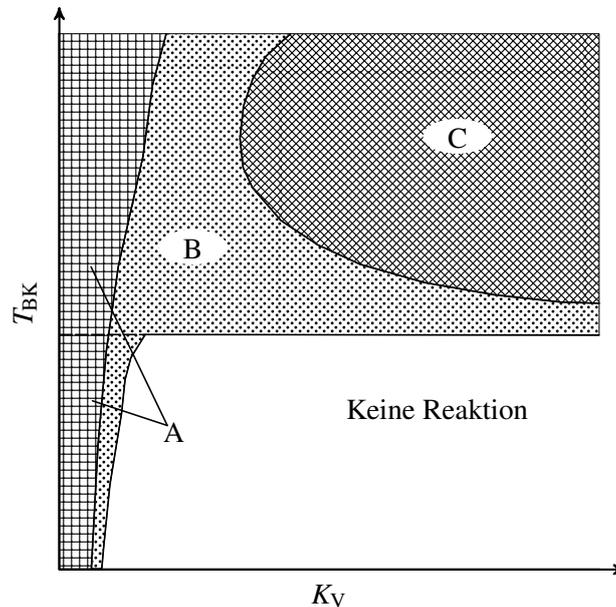


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der Verbrennungsregimes abhängig von der Rezirkulationsrate und der Brennkammertemperatur nach Wüning [130]: A - konventionelle Flamme, B - instabiler Bereich, C - Regime der verdünnten Verbrennung.

als die Selbstzündtemperatur des Gemisches ist und der maximale Temperaturhub während der Oxidation kleiner als die Selbstzündtemperatur des Gemisches ist.“ Tabelle 3.1 und Abbildung 3.3 veranschaulichen diese Definition. Zusätzlich zeigen sowohl Abbildung als auch Tabelle die Definitionen für die weiteren Verbrennungsregime: die konventionelle Verbrennung (*Feedback Combustion*) sowie die *High Temperature Combustion* (HiTeCo oder HiTAC). In Abbildung 3.3 ist noch der Bereich der pilotierten Verbrennung (*Pilot Combustion*) eingezeichnet, in dem die Brennstoffoxidation nur mit einer Pilotflamme aufrechterhalten werden kann. Li et al. [72] ergänzen explizit für die vorge-mischte verdünnte Verbrennung, dass für dieses Verbrennungsregime die lokale Reaktandentemperatur und die lokale Sauerstoffkonzentration ausschlaggebend sind. Außerdem sollte lokal die Flammengeschwindigkeit kleiner sein als die Strömungsgeschwindigkeit, um die Verdünnung mit Abgas ohne vorherige Stabilisierung der Flamme zu ermöglichen.

Merkmale der Verfahren HiTeCo (High Temperature Combustion) und HiTAC (High Temperature Air Combustion) sind die hohe Vorwärmtemperatur und die niedrige Sauerstoffkonzentration zwischen 2 vol% bis 5 vol% [53]. Nach Argho-

de [7] und Khalil und Gupta [64] basiert die CDC (Colorless Distributed Combustion) auf dem Regime der High Temperature Combustion.

Tabelle 3.1: Einteilung der Verbrennungsregime anhand der Reaktandentemperatur T_{Reakt} , der Selbstzündtemperatur T_{SZ} und des Temperaturhubes während der Verbrennung ΔT (nach [15, 27]).

Verbrennungsregime	Reaktandentemperatur	Temperaturhub während der Verbrennung
Feedback Combustion	$T_{\text{Reakt}} \leq T_{\text{SZ}}$	$\Delta T \geq T_{\text{SZ}}$
High Temperature Combustion	$T_{\text{Reakt}} \geq T_{\text{SZ}}$	$\Delta T \geq T_{\text{SZ}}$
MILD Combustion	$T_{\text{Reakt}} \geq T_{\text{SZ}}$	$\Delta T \leq T_{\text{SZ}}$

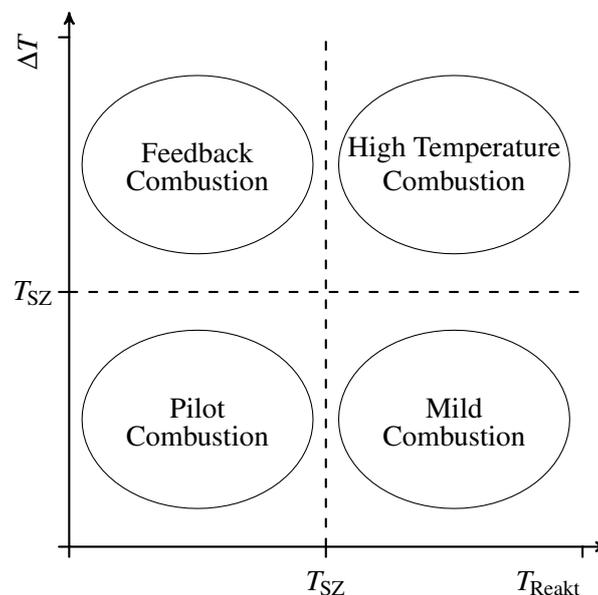


Abbildung 3.3: Einteilung der Verbrennungsregime nach Cavaliere und de Joannon [27] und Dunn-Rankin [35] in Abhängigkeit von der Reaktandentemperatur und dem Temperaturhub während des Verbrennungsprozesses.

3.2 Verbrennungskonzept der zyklisch-periodischen Mischung (VZPM)

Das Regime der verdünnten Verbrennung wird auch für das Verbrennungskonzept der zyklisch-periodischen Mischung (VZPM) angewendet. Es wird in Ka-

pitel 5 und Kapitel 6 für die Verwendung in einer Mikrogasturbine untersucht. Dazu wird nachfolgend ein Überblick über ausgewählte Brennkammerkonzepte von Mikrogasturbinen gegeben und anschließend das Design der Brennkammer erläutert.

3.2.1 Brennkammerkonzepte für Mikrogasturbinen

Turbec T100

Die Brennkammer der in dieser Arbeit untersuchten Turbec T100 (Abbildung 3.4) besteht aus einer kleinen Vorbrennkammer, in der der Pilotbrenner sitzt, und einer großen Hauptbrennkammer, in die über einen Drallerzeuger das Brennstoff-Luft-Gemisch am Flächensprung eingebracht wird. Dort stabilisiert sich die Flamme. Dieses Konzept wurde für Erdgas entwickelt und ist für einen Betrieb mit einer lokalen Luftzahl $\lambda \approx 2,4$ ausgelegt. Die überschüssige Luft, die zur Kühlung der Brennkammer verwendet wurde, wird vor der Turbine stromab eingemischt. Dieses Konzept ist nur bedingt mit Wasserstoff kompatibel. Durch die deutlich erhöhte Reaktivität von Wasserstoff würde es besonders im Bereich des Pilotbrenners zu deutlich erhöhten Stickoxidemissionen kommen, wenn nicht sogar zu Schäden an der Brennkammer führen. Des Weiteren sind die Aufenthaltszeiten des Wasserstoffs im Drallerzeuger schwer kontrollierbar. Sie stellen somit ein Sicherheitsrisiko dar, da sich die Vorwärmtemperatur der Luft durch den rekuperierten Gasturbinenprozess im Bereich der Selbstzündgrenze von Wasserstoff befindet und die Reaktivität eines Wasserstoff-Luft-Gemisches deutlich höher ist, als die eines Erdgas-Luft-Gemisches.

Capstone C60

Die Brennkammer der Capstone C60 basiert auf einer zweistufigen tangentialen Frischgaseindüsung in eine Ringbrennkammer (Abbildung 3.5). Das Frischgas wird sequentiell zuerst mit zwei und dann mit vier tangentialen Injektoren eingebracht. Weiter stromab wird das Abgas mit der Verdünnungsluft vor der Turbine verdünnt. Die Brennkammer zeichnet sich durch seine niedrigen

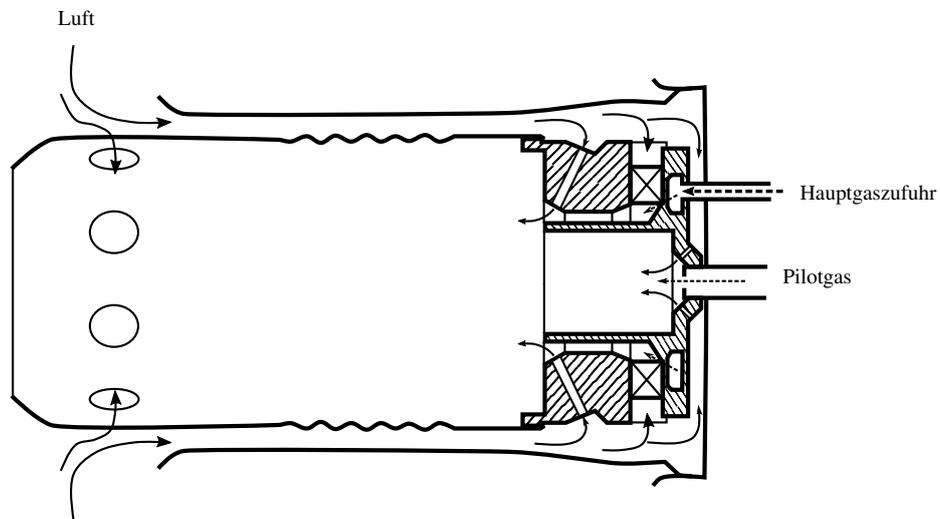


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der Brennkammer der Turbec T100.

NO_x -Emissionen im Betrieb mit Erdgas aus, da die gute Vermischung mit Inertgas durch den aufgeprägten Drall die Schadstoffbildung hemmt. Therkelsen et al. [115] haben für diese Brennkammer den Wasserstoffbetrieb untersucht. Die NO_x -Emissionen im Wasserstoffbetrieb sind im Vergleich zur Erdgasverbrennung deutlich erhöht, sie liegen im Bereich größer 50 ppm normiert auf 15 % O_2 .

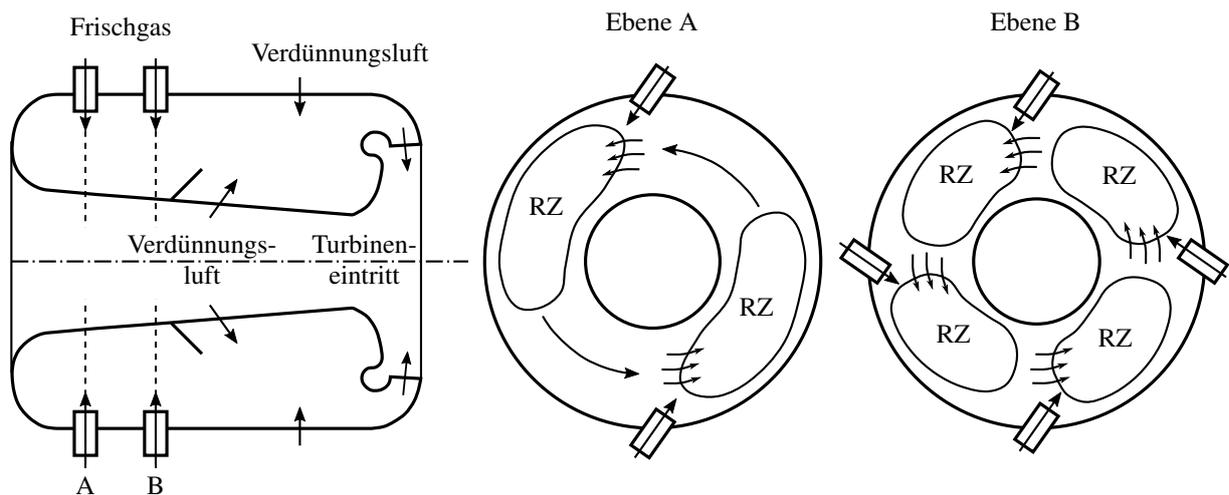


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung der Brennkammer der Captstone C60 (nach [20]).

Turbec T100 DLR Stuttgart

Eine Möglichkeit, die verdünnte Verbrennung in der Mikrogasturbine Turbec T100 anzuwenden, wurde am DLR in Stuttgart untersucht (Abbildung 3.6) [68, 75, 98, 134, 135]. Die Brennkammer basiert dabei auf dem Konzept nach Wüning [130], allerdings wird der Brennstoff vorgemischt in die Brennkammer eingebracht. Bei 90 vol% Wasserstoff wurden NO_x -Emissionen von unter 10 ppm erreicht [75]. Zanger et al. [134, 135] untersuchten die konkrete Anwendung für die Turbec T100. Im Zuge dessen wurde die Brennkammer um eine Pilotstufe erweitert, was sich negativ auf die NO_x -Emissionen auswirkte, aber den Betriebsbereich erheblich erweiterte.

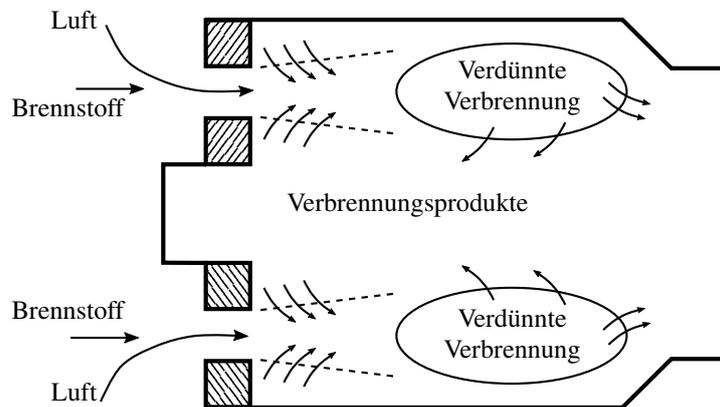


Abbildung 3.6: Schematische Darstellung der Brennkammer des DLR Stuttgart (nach [20]).

3.2.2 Design der VZPM-Brennkammer

Um die NO_x -Emissionen im Wasserstoffbetrieb gegenüber den gezeigten Konzepten noch weiter zu reduzieren, wird das Verbrennungskonzept der zyklisch-periodischen Mischung hinsichtlich seiner Eignung für Wasserstoff untersucht. Dieses Konzept wurde ursprünglich für eine Gasturbinenanwendung mit Erdgas entwickelt und zeichnet sich durch einen großen Betriebsbereich, NO_x -Emissionen kleiner 1,0 ppm und CO-Werte kleiner 10 ppm jeweils normiert auf 15 % O_2 aus [21].

Die Brennkammer besteht aus drei Ebenen, in die jeweils tangential mit je zwei Frischgasinjektoren das Brennstoff-Luft-Gemisch eingedüst wird (Abbildung 3.7). Dadurch bildet sich eine starke Drallströmung in der Brennkammer aus, die die Einmischung der Verbrennungsprodukte in das Frischgas begünstigt. Innerhalb einer Ebene laufen drei Prozessschritte ab [15, 21]:

- Mischung: In das Frischgas werden Verbrennungsprodukte eingemischt.
- Zündung: Selbstzündung des Gemisches an der Scherschicht zwischen Frischgas und den heißen Produkten.
- Reaktion: Die in der Reaktionszone entstandenen Verbrennungsprodukte dienen wieder zur Verdünnung des stromab gelegenen Frischgasstrahls.

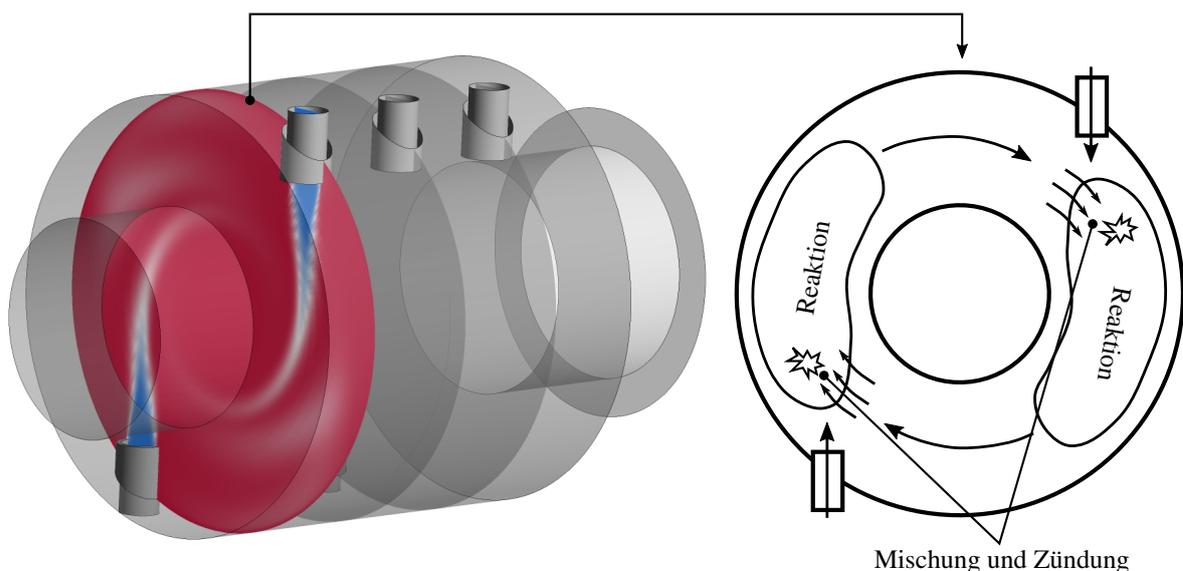


Abbildung 3.7: Schematische Darstellung der VZPM-Brennkammer und des Verbrennungskonzeptes der zyklisch-periodischen Mischung.

Das Frischgas wird mit einem Wirbelvormischinjektor technisch vorgemischt. Brückner-Kalb [21, 22] hat dieses Konzept gewählt, da mit geringem Druckverlust eine ausreichend gute Vormischung erreicht wird. Der Wirbelvormischinjektor besteht aus einem Deltaflügel der im Injektor der Strömung ein großskaliges Wirbelpaar aufprägt. Stromab wird in einer Jet-in-Crossflow Anordnung der Brennstoff eingedüst (Abbildung 3.8).

Die Brennkammer zeigt alle zuvor gezeigten Merkmale der verdünnten Verbrennung. Die NO_x -Emissionen liegen im Bereich von 1 ppm $15\% \text{O}_2$ und weisen somit auf eine effiziente Verdünnung von Frischgas mit Abgas in der Brennkammer durch die Drallströmung hin. Außerdem ist mit bloßem Auge keine Flammenfront mehr sichtbar. Bei der Anwendung in der Mikrogasturbine werden auch die Bedingungen der MILD-Verbrennung oder HiTAC erfüllt. Der Bereich der Selbstzündung von Erdgas beginnt bei etwa $T_{SZ} \approx 800 \text{ K}$, was im Bereich der Brennkammereintrittstemperatur von Mikrogasturbinen liegt. Abhängig vom Temperaturhub während des Verbrennungsprozesses sind, global betrachtet, die Voraussetzungen für MILD oder HiTAC erfüllt.

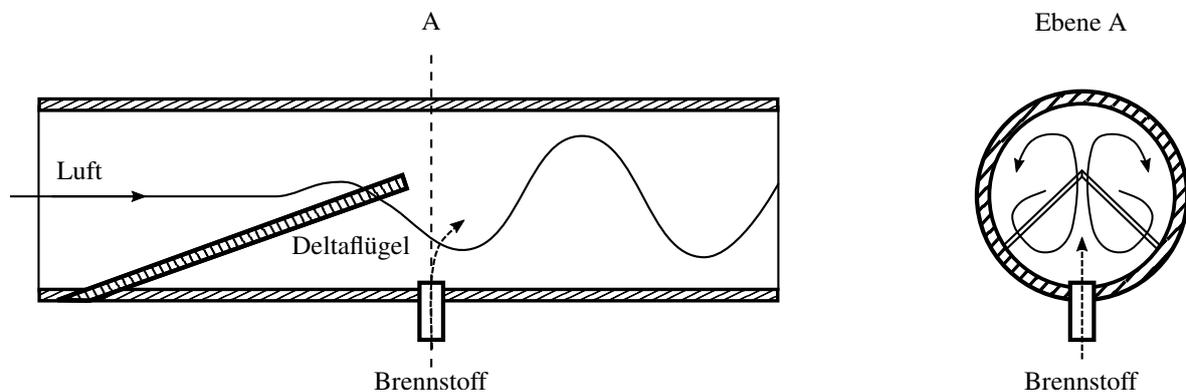


Abbildung 3.8: Schematische Darstellung des Mischkonzepts des Wirbelvormischinjektors (WVMI).

3.3 Numerische Simulation der reagierenden Brennkammerströmung

Zur Modellierung der Brennkammerströmung und der Verbrennungsreaktion im Regime der verdünnten Verbrennung wird im Rahmen dieser Arbeit das kommerzielle Softwarepaket ANSYS Fluent 14.5 verwendet. Strömungen mit hohen Drallzahlen wurden bereits im Zusammenhang mit Zyklonabscheidern aus der Verfahrenstechnik untersucht, allerdings ohne Reaktion [31, 33, 56, 61, 87]. Wichtig für die Modellierung ist die Auswahl einer für die relevanten Effekte geeigneten Kombination aus Turbulenz- und Verbrennungsmodell. Die Wahl des

Turbulenzmodells setzt dabei ein grundlegendes Verständnis von Strömungen mit hoher Drallintensität voraus.

3.3.1 Zur Strömungsmechanik von Drallströmungen

Drallzahl S

Wichtiges Merkmal zur Charakterisierung einer Drallströmung ist die Drallzahl S. Sie ist das Verhältnis aus Tangentialimpuls zu Axialimpuls. Die Definition nach Beer et al. [14] für eine isotherme Strömung lautet:

$$S_{iso} = \frac{G_{\varphi}}{R_{Ref} \cdot G_x}, \quad (3.10)$$

mit

$$G_{\varphi} = \int_0^{R_{Ref}} u_{\varphi} r \rho u_x 2\pi r dr = const., \quad (3.11)$$

$$G_x = \int_0^{R_{Ref}} u_x \rho u_x 2\pi r dr + \int_0^{R_{Ref}} p 2\pi r dr = const.. \quad (3.12)$$

Dabei bezeichnet r den Radius, ρ die Dichte und p den Druck des Fluides. R_{Ref} ist der Referenzradius, auf den die Drallzahl bezogen wird. Die Geschwindigkeitskomponenten sind mit u_{φ} in tangentialer Richtung und mit u_x in axialer Richtung benannt.

Tepliczky [114] berechnet die Drallzahl durch die Mittelung des örtlichen Tangentialimpulses bezogen auf den Referenzradius und die mittlere axiale Geschwindigkeit $\bar{u}_{x,0}$:

$$S_m = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{r \cdot u_{\varphi}(r)}{R_{Ref} \cdot \bar{u}_{x,0}}. \quad (3.13)$$

So kann punktweise aus experimentellen Daten die Drallzahl berechnet werden.

Beschreibung der Geschwindigkeitskomponenten

Busenthür [23] führte Untersuchungen zur mathematische Beschreibung der Geschwindigkeitskomponenten in einer nicht reaktiven, stationären, verdrallten Rohrströmung durch. Für die Tangentialgeschwindigkeit u_φ in Abhängigkeit vom Radius r gilt:

$$\frac{u_\varphi(r)}{\bar{u}_{x,0}} = \frac{a_1}{r} \left(1 - \exp\left(\frac{-r^{a_3}}{a_2}\right) \right). \quad (3.14)$$

Die Konstanten a_1 , a_2 und a_3 wurden zunächst empirisch bestimmt. Anhand der Ergebnisse schlägt Busenthür die Wahl der Konstanten a_1 und a_2 in Abhängigkeit von der Drallzahl S_m vor, die allerdings nur bis zu einer Drallzahl von $S_m = 2,0$ validiert sind. Für a_3 wird der Wert 2 angenommen.

Der allgemeine Ansatz lässt sich aus den Wirbelmodellen für den Rankine-Wirbel und weiterführend aus dem Hamel-Oseen-Wirbel herleiten. Der Rankine-Wirbel ist ein einfaches Modell eines zusammengesetzten Wirbels für eine reale, ebene, stationäre und axialsymmetrische Wirbelströmung, der im Kern aus einem Festkörperwirbel und im Außenbereich aus einem Potentialwirbel besteht. Abgegrenzt werden diese beiden Bereiche durch den Kernradius r_K , an dem dadurch eine unstete Stelle entsteht (vgl. Abbildung 3.9). Der Hamel-Oseen-Wirbel beseitigt diese Unstetigkeit, indem der Einfluss der Zähigkeit berücksichtigt wird [117]:

$$u_\varphi(r,t) = \frac{\Gamma_\infty}{2\pi r} \left(1 - \exp\left(\frac{-r^2}{r_1^2}\right) \right) \quad (3.15)$$

mit

$$r_1^2 = 4\nu^*(t_0 + t). \quad (3.16)$$

Γ_∞ bezeichnet die Gesamtzirkulation des Wirbelfeldes, t_0 die Bezugszeit zum Zeitpunkt $t = 0$ und ν^* die kinematische Viskosität. Abbildung 3.9 zeigt den qualitativen Verlauf eines Rankine-Wirbels sowie das Abklingen des Hamel-Oseen-Wirbels für $t \rightarrow \infty$. Ergänzend sei angemerkt, dass der Hamel-Oseen-Wirbel das Abklingen in einem unendlich ausgedehnten Fluid beschreibt. Daher kann die Haftbedingung an der Wand in Modellen für verdrallte Rohrströmungen, die an diese Funktionsklasse angelehnt sind wie in Gleichung (3.14), nicht berücksichtigt werden [127].

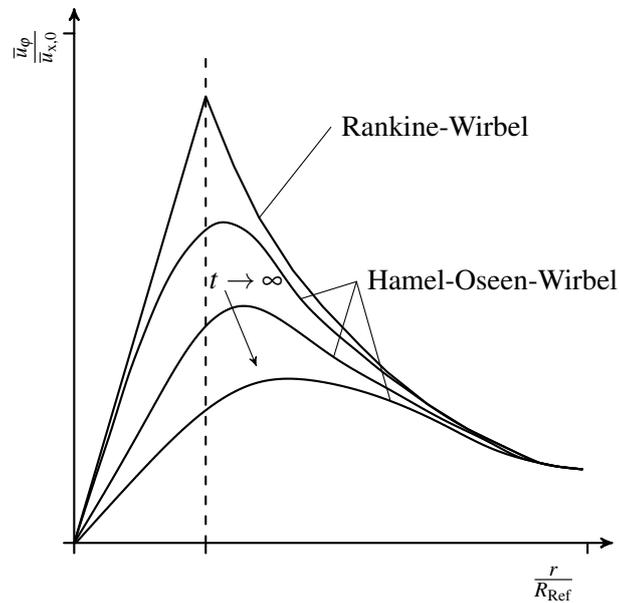


Abbildung 3.9: Qualitativer Verlauf der Tangentialgeschwindigkeit für den Rankine-Wirbel und den Hamel-Oseen-Wirbel.

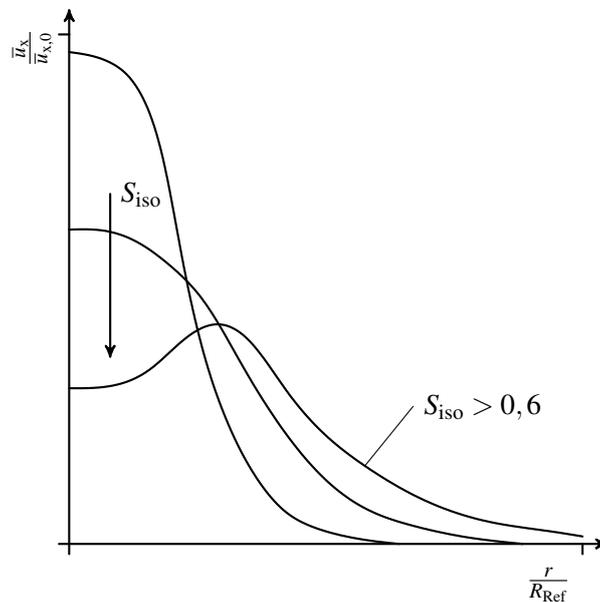


Abbildung 3.10: Qualitativer Verlauf der Axialgeschwindigkeit abhängig von der Drallzahl.

Die Tangentialgeschwindigkeit dominiert in einem Strömungsfeld mit starkem Drall den Betrag der Geschwindigkeit [102, 127], daher wird auf das Einführen der mathematischen Formulierungen der Geschwindigkeiten einer Drallströmung in axialer und radialer Richtung an dieser Stelle verzichtet.

Abbildung 3.10 zeigt den qualitativen Verlauf des axialen Geschwindigkeitsprofils für verschiedene Drallzahlen. Ab einer Drallzahl $S_{\text{iso}} \geq 0,6$ ist der axiale Druckgradient groß genug um das Fluid stromauf zu bewegen, daher bildet sich im Kern der Strömung eine Rückströmzone in axialer Richtung aus [127].

Ebenfalls bildet sich bei Drallzahlen größer 0,6 und hohen Reynoldszahlen eine instationäre Instabilität des Wirbelkerns aus [3]. Durch die axiale Rückströmung vergrößert sich der Wirbelkern zunächst, bis der aufplatzt. Durch diese Störung der Strömung beginnt das Zentrum der Strömung sich auf einer Schraubenlinie um die Symmetrieachse der Strömung zu bewegen. Dieses Phänomen wird als präzessierender Wirbelkern bezeichnet [74].

3.3.2 Turbulenzmodellierung für hohe Drallzahlen

Die auf makroskopischer Ebene durch den präzessierenden Wirbelkern zeitlich instationäre Strömung erfordert eine zeitlich aufgelöste numerische Berechnung (URANS). Eine zeitunabhängige Lösung kann nur bei Anwendung linearer Diskretisierungsschemata und 2-Gleichungsturbulenzmodellen erreicht werden, was zu starken Abweichungen der berechneten Umfangsgeschwindigkeiten von den experimentellen Daten führt. Vergleichbare Beobachtungen wurden im Rahmen einer experimentellen Untersuchung an einem Zyklonabscheider gemacht [33].

Die hohe Drallzahl stellt besondere Anforderungen an die Turbulenzmodellierung und die verwendeten Diskretisierungsschemata. Geschwindigkeitsmessungen von Nettinger [83] zeigen, dass $S_m = 3,7$ für die VZPM-Brennkammer im nicht reaktiven Fall gilt. Mit der Definition von S_{iso} ergibt sich für die VZPM-Brennkammer $S_{\text{iso}} = 4,1$. Laut Busenthür [23] ist keine der Definitionen den anderen deutlich überlegen. Nach Syred und Beer [111] ist die Strömung in der Brennkammer den Zyklonströmungen ($S_{\text{iso}} \geq 3$) zuzuordnen.

Die Besonderheiten der Turbulenzmodellierung von Strömungen hoher Drallstärke werden etwa seit Mitte der 1980er Jahre insbesondere im Zusammenhang mit der Optimierung der Durchströmung von Zyklonabscheidern untersucht [31, 87]. Vergleiche zwischen experimentell bestimmten Geschwindig-

keitsprofilen und numerischen Ergebnissen, bei denen Turbulenzmodelle verwendet werden, die vereinfachend Isotropie der turbulenten Spannungen annehmen, zeigen insbesondere für die Umfangsgeschwindigkeiten teilweise starke Abweichungen [56]. Bessere Ergebnisse können mit Turbulenzmodellen erreicht werden, die Anisotropie bei der Berechnung der Reynoldsspannungen zulassen [61]. Im Rahmen dieser Arbeit wird daher ausschließlich das Reynolds-Spannungsmodell *Reynolds Stress, Stress-Omega* [6] verwendet, um Modellierungsfehler, insbesondere bei der Berechnung der Umfangsgeschwindigkeiten, möglichst zu vermeiden.

3.3.3 Modellierung der verdünnten Verbrennung

Zur Simulation der turbulenten verdünnten Verbrennung in der VZPM-Brennkammer wird ein Modell benötigt, das in der Lage ist, sowohl die durch die chemische Kinetik bestimmte Reaktion im vorherrschenden Bereich der verteilten Reaktionszonen, als auch mögliche Reaktion in den Scherschichten im Nahbereich der Injektoren ausreichend genau abzubilden. Die möglichen Bedingungen, unter denen die Reaktion dabei ablaufen kann, erstrecken sich über einen weiten Bereich von Damköhler-Zahlen, wobei im Bereich $Da \approx 1$ kinetische und turbulente Einflussfaktoren gleichermaßen wichtig sind [70].

Einfache Verbrennungsmodelle berechnen die gemittelte Reaktionsrate über eine Proportionalität mit der lokalen turbulenten Mischungsrate (sog. Eddy Break-Up [108, 109] bzw. Eddy-Dissipation Modelle [76])

$$\bar{\omega} \propto \frac{\bar{\epsilon}}{k}. \quad (3.17)$$

Dieser Ansatz ist für Verbrennungsvorgänge geeignet, bei denen die Reaktionskinetik eine untergeordnete Rolle spielt und die Reaktionsrate ausschließlich durch turbulente Mischvorgänge dominiert wird (schnelle Chemie / hohe Damköhler-Zahlen) [47]. Da in der VZPM-Brennkammer die Reaktion hauptsächlich unter Bedingungen stattfindet bei denen chemische Vorgänge die Reaktionsrate bestimmen (kleine Damköhler-Zahlen) sind solche Verbrennungsmodelle grundsätzlich zur Simulation der verdünnten Verbrennung nicht ausreichend.

Die CFD-Software ANSYS Fluent enthält Verbrennungsmodelle, die die Berechnung gemittelter Reaktionsraten bei turbulenten Verbrennungsvorgängen auf der Basis von reduzierten und detaillierten chemischen Mechanismen ermöglichen [6] und bereits zur Modellierung verdünnter Verbrennung verwendet wurden [1, 42]:

- Das Finite-Rate/Eddy-Dissipation (ED-FR) Modell
- Das Eddy-Dissipation Concept (EDC) Modell [24, 76].

Im Finite-Rate/Eddy-Dissipation Modell wird die mittlere Reaktionsrate einmal über einen Arrhenius-Ansatz berechnet, wobei zur Berechnung gemittelte Werte für Speziesmassenbrüche und Temperatur verwendet werden, und einmal über das Eddy-Dissipation Modell nach Magnussen [77]. Die jeweils kleinere der beiden Reaktionsraten wird dann als Quellterm in der weiteren Berechnung verwendet. Dieser Ansatz eignet sich nur bedingt zur Verwendung mit detaillierten Reaktionsmechanismen, da aufgrund der potentiell stark schwankenden Werte der Reaktionsraten die Verwendung von reduzierten Mechanismen mit maximal zwei Teilreaktionen empfohlen wird [94]. Darüber hinaus kann die Verwendung gemittelter Variablenwerte im Arrhenius-Ansatz, aufgrund der starken Nichtlinearität, zu starken Abweichungen der berechneten Reaktionsraten gegenüber den realen Gegebenheiten führen. Somit wird unter Umständen die Wahl des kleinsten Quellterms bei mittleren Damköhlerzahlen auf der Grundlage verzerrter Werte getroffen. Ayed et al. [51] zeigen im Rahmen einer numerischen und experimentellen Studie an einer mit Wasserstoff betriebenen Gasturbinenbrennkammer, dass das EDC-Modell gegenüber dem ED-FR-Modell hinsichtlich der Struktur der Reaktionszone bessere Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen liefert.

Im Rahmen dieser Arbeit wird daher das EDC-Modell zur Berechnung mittlerer Reaktionsraten verwendet, da damit auch detaillierte Reaktionsmechanismen unter Berücksichtigung des Turbulenzeinflusses verwendet werden können. Das ist insbesondere für die Wasserstoffverbrennung von Interesse, da aufgrund der noch beherrschbaren Menge von Einzelreaktionen und beteiligten Spezies mit detaillierten Reaktionsmechanismen (z. B. [85]) gerechnet werden kann. Mit dem EDC-Modell konnten bereits verschiedene Experimente aus dem Regime

der verdünnten Verbrennung mit Erfolg simuliert werden [5, 51, 70, 86]. Shababian et al. [99] untersuchen verschiedene Kombinationen aus Turbulenzmodell und Verbrennungsmodell, wobei mit der Kombination aus einem Reynoldsspannungsmodell und dem EDC-Modell die beste Übereinstimmung mit experimentellen Daten einer Syngas-Jetflamme bei MILD-Bedingungen erreicht wird.

Die Grundlagen des EDC-Modells werden nachfolgend kurz erläutert. Nach Peters [88] laufen chemische Reaktionen in turbulenter Strömung dort ab, wo die beteiligten Spezies lokal auf kleinen Skalen miteinander in Kontakt kommen. Bei der Verwendung gemittelter Bilanzgleichungen (RANS) werden diese Vorgänge weder zeitlich noch räumlich aufgelöst und müssen daher modelliert werden. Das wesentliche Konzept des EDC-Modells ist die gedachte Aufteilung eines Kontrollvolumens (Rechenzelle) in einen Anteil, der die reagierenden kleinen Skalen repräsentiert, und einen Anteil, der die Umgebung darstellt. Darin laufen lediglich turbulente Mischvorgänge ab. Diese Aufteilung ist schematisch in Abbildung 3.11 dargestellt. Der Index * kennzeichnet Größen, die im Zusammenhang mit den reagierenden feinen Skalen stehen. Im Bereich der kleinen Skalen

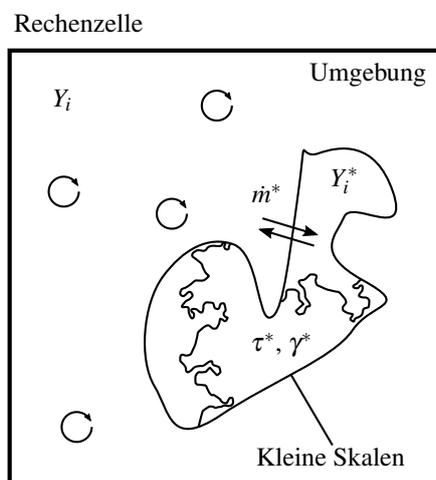


Abbildung 3.11: Gedachte Aufteilung einer RANS Rechenzelle in einen lokal laminar reagierenden Anteil und eine Umgebung in der lediglich Mischvorgänge stattfinden.

läuft die Verbrennungsreaktion bei laminaren Bedingungen ab. Zwischen den gedachten Bereichen findet Massenaustausch statt. Die Zeit- und Längenskalen zur Abgrenzung des feinskaligen Bereichs werden aus dem Konzept der turbulenten

Energiekaskade [90, 113] abgeleitet und aus mittleren Größen des Turbulenzmodells berechnet.

Der Anteil der kleinen Skalen an der Gesamtmasse der Rechenzelle wird ebenfalls auf der Grundlage von Turbulenzvariablen der mittleren Strömung berechnet [6, 70, 76]:

$$\gamma^* = \left(\frac{3}{4} \cdot \frac{C_{D2} \nu \cdot \varepsilon}{C_{D1}^2 k^2} \right)^{1/4} = C_\gamma \cdot \frac{1}{\sqrt[4]{\text{Re}_t}}. \quad (3.18)$$

Die Konstanten haben die Werte $C_{D1} = 0,135$ und $C_{D2} = 0,5$ (damit ergibt sich $C_\gamma = 2,13$), Re_t ist die turbulente Reynoldszahl. Der Anteil des an der Reaktion beteiligten Massenanteils wächst demnach hin zu kleineren turbulenten Reynoldszahlen stark an. Die auf die Masse der reagierenden Strukturen bezogene Massenaustauschrate mit der Umgebung wird wie folgt berechnet:

$$\dot{m}^* = \sqrt{\frac{3}{C_{D2}} \cdot \frac{\varepsilon}{\nu}}. \quad (3.19)$$

Der reziproke Wert ist ein Maß für die mittlere Aufenthaltszeit der Reaktanden im Bereich der gedachten feinen Strukturen [70]:

$$\tau^* = \frac{1}{\dot{m}^*} = C_\tau \cdot \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}}. \quad (3.20)$$

Die Konstante hat darin den Wert $C_\tau = 0,408$. In Abhängigkeit des modellierten Massenanteils des reagierenden Volumens γ^* und der modellierten Aufenthaltszeit τ^* werden die mittleren Quellterme in den Speziestransportgleichungen wie folgt berechnet [76]:

$$\bar{\omega}_i = \frac{\rho(\gamma^*)^2}{\tau^* [1 - (\gamma^*)^3]} (Y_i^* - Y_i). \quad (3.21)$$

In Gleichung (3.21) bezeichnet Y_i^* die Massenbrüche der Spezies in den reagierenden feinen Strukturen nach einer Reaktion mit der Aufenthaltszeit τ^* und entsprechend Y_i die Speziesmassenbrüche im übrigen (nichtreagierenden) Bereich. Die im Standardmodell verwendeten Werte der Modellierungskonstanten C_τ , C_γ ergaben sich empirisch auf der Basis von zahlreichen Experimenten [40, 48]. Die durch die chemische Umsatzrate über die Zeit τ^* entstandene Gemischzusammensetzung in Form der Speziesmassenbrüche Y_i^* wird aus der Arrhenius-Rate

für eine Reaktoreinheit mit konstantem Druck (*Constant Pressure Reactor*) berechnet. Dabei werden die mittlere Temperatur und die mittleren Massenanteile der einzelnen Spezies Y_i der gesamten Rechenzelle als Anfangswerte verwendet. Der Term $(Y_i^* - Y_i)$ in Gleichung (3.21) beinhaltet damit den chemischen Einfluss auf die Reaktionsrate, während der Vorfaktor berücksichtigt, dass eine Reaktion nur in einem variablen Anteil der Rechenzelle während einer variablen Aufenthaltszeit stattfindet. Damit kann das EDC-Modell den im Rahmen der verdünnten Verbrennung in der VZPM-Brennkammer auftretenden, breiten Bereich verschiedener Damköhlerzahlen abdecken.

Neuere Untersuchungen zeigen, dass bei der Modellierung der verdünnten Verbrennung die Ergebnisqualität verbessert werden kann, wenn die Standardwerte der Modellkonstanten modifiziert werden. De et al. [32] untersuchen eine Jet-in-Hot-Crossflow-Flamme mit CFD-RANS, wobei eine Sensitivitätsanalyse bezüglich der Modellierungskonstanten des EDC-Modells durchgeführt wird. Es zeigt sich, dass das EDC-Modell bei niedrigen turbulenten Reynolds-Zahlen die Reaktionsraten tendenziell überschätzt, aber dennoch zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Dieser Effekt kann über eine Anpassung der Konstanten C_τ ausgeglichen werden. Aminian et al. [4] verwenden für Erdgasverbrennung im Regime der verdünnten Verbrennung den Wert $C_\tau = 1,5$, um das Zeitmaß τ^* zu erhöhen und den gewünschten Verbesserungseffekt zu erzielen.

Voruntersuchungen, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden, haben gezeigt, dass die Geschwindigkeitsprofile in der Simulation der Erdgasverbrennung mit dem 1-Schritt-Mechanismus und $C_\tau = 1,5$ am besten mit dem Experiment übereinstimmen. Für die Simulation der Wasserstoffverbrennung mit dem detaillierten Mechanismus wird der Standardwert verwendet.

4 Prozessmodellierung und Optimierung des Gesamtsystems

Abbildung 4.1 zeigt die detaillierten Abläufe des Systems MGT-DE. Der Mikrogasturbinenprozess besteht aus den Komponenten Verdichter, Rekuperator Brennkammer, Turbine und Generator. Zusätzlich ist der Bypass BP um den Rekuperator eingezeichnet, mit dem das Temperaturniveau im Abgas angepasst werden kann. Die Wärme wird vom Abgas an das hydrierte LOHC übertragen, um die endotherme Freisetzungsreaktion im Reaktor aufrecht zu erhalten. Die Restwärme des dehydrierten LOHC wird in der Vorwärmung an das hydrierte LOHC übertragen. Mit den in Kapitel 2 gezeigten Grundlagen kann das System auf Basis von Energie- und Stoffbilanzen modelliert und hinsichtlich des Gesamtwirkungsgrades optimiert werden.

4.1 Modellierung des Moduls Mikrogasturbine

Dem Modell der Mikrogasturbine (MGT) wird der in Kapitel 2 gezeigte Gasturbinenprozess für den rekuperierten Fall zugrunde gelegt. Wegen der inneren Wärmerekuperation muss das Gleichungssystem iterativ gelöst werden.

Die Wirkungsgrade einzelner Komponenten sind analog zu Kesseli et al. [62], Ibrahim et al. [58] und Hampel et al. [52] gewählt. Prozessparameter sind dem Datenblatt der Turbec T100 [119] entnommen. Die Druckverluste werden gemäß dem Mikrogasturbinenmodell nach Pourhasanzadeh [91] berücksichtigt.

Die Temperatur T_2 nach dem Verdichter berechnet sich mit

$$T_2 = \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa} \frac{1}{\eta_{pol,V}}} \cdot T_1. \quad (4.1)$$

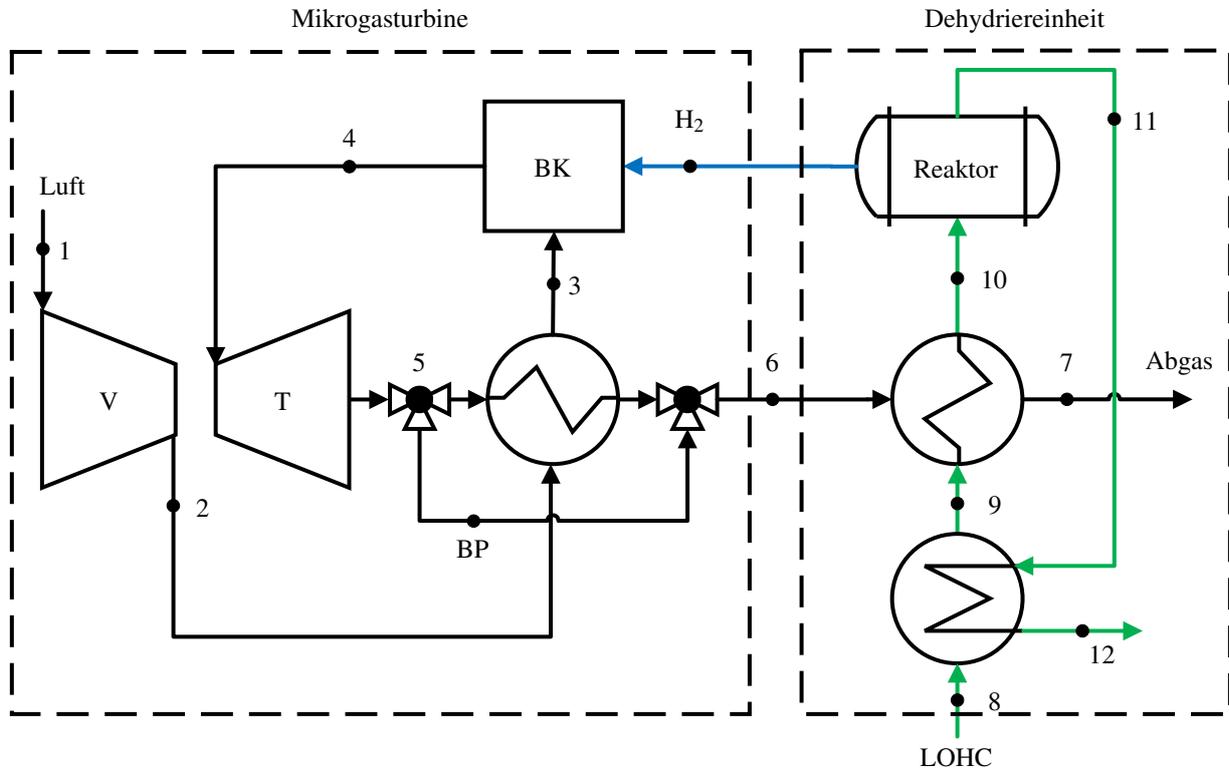


Abbildung 4.1: Prozessschema der Kopplung von Mikrogasturbine und Dehydriereinheit.

Die Temperatur T_4 am Brennkammeraustritt wird mit der Energiebilanz (siehe Gleichung (2.3)) um die Brennkammer berechnet:

$$T_4 = \frac{1}{\left(1 + \frac{\dot{m}_{Br}}{\dot{m}_L}\right) \cdot \bar{c}_{p,4}} \cdot \left[\bar{c}_{p,3} (T_3 - T_{ref}) + \frac{\dot{m}_{Br}}{\dot{m}_L} \bar{c}_{p,Br} (T_F - T_{ref}) + \frac{\dot{m}_{Br} H_{u,Br} \eta_{Bk}}{\dot{m}_L} \right] + T_{ref}. \quad (4.2)$$

Die mittleren Wärmekapazitäten $\bar{c}_{p,i}$ werden mit Hilfe der NASA-Polynome bestimmt. Analog zu Gleichung (4.1) ergibt sich T_5 aus der Expansion von $4 \rightarrow 5$:

$$T_5 = \left(\frac{p_5}{p_4} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa} \frac{1}{\eta_{pol,T}}} \cdot T_4. \quad (4.3)$$

Die Temperatur T_6 am Austritt des Rekuperators wird mit der Annahme des konstanten Wärmedurchgangs nach Ibrahim et al. [58] modelliert (Gleichung

(2.7)). Aus der Betriebscharakteristik für einen Gegenstrom-Wärmeübertrager ergibt sich für T_6

$$T_6 = \frac{T_5 \cdot \left(1 - \frac{\dot{C}_c}{\dot{C}_h}\right) - T_2 \cdot \left(\exp\left(-UA \left(\frac{1}{\dot{C}_c} - \frac{1}{\dot{C}_h}\right)\right) - 1\right)}{1 - \frac{\dot{C}_c}{\dot{C}_h} \cdot \exp\left(-UA \left(\frac{1}{\dot{C}_c} - \frac{1}{\dot{C}_h}\right)\right)}. \quad (4.4)$$

Mittels der Energiebilanz um den Rekuperator berechnet sich T_3 zu

$$T_3 = T_2 + \frac{\dot{C}_h}{\dot{C}_c} (T_5 - T_6). \quad (4.5)$$

Das Bypassverhältnis ζ_{BP} ist dabei implizit im Wärmekapazitätsstrom \dot{C}_h enthalten.

Die Gleichungen (4.1) - (4.5) werden so lange iterativ berechnet, bis der Temperaturunterschied ΔT_3 kleiner $1 \cdot 10^{-2}$ K ist. Im letzten Schritt wird der elektrische Wirkungsgrad der Mikrogasturbine η_{el} unter Berücksichtigung des Wirkungsgrades der Welle und des Generators sowie der nötigen Arbeit zur Kompression des Wasserstoffs auf Betriebsdruck rechnerisch ermittelt.

Die Validierung des gewählten Modells mit dem Modell nach Zimmermann [139] zeigt eine gute Übereinstimmung [44, 52]. Die relevanten Temperaturen Brennkammereintrittstemperatur T_3 , Turbineneintrittstemperatur T_4 und Abgasstemperatur T_6 werden im Bereich von 5 K genau getroffen. Die Modellierung des Bypasses wurde analog zu Ibrahim et al. [58] implementiert und zeigt auch das gleiche Verhalten. Mit zunehmendem Bypass muss der Brennstoffmassenstrom für die Brennkammer erhöht werden, da durch den Bypass der übertragene Wärmestrom im Rekuperator geringer ist [44]. Dies führt dazu, dass die Brennkammereintrittstemperatur T_3 sinkt. Um die Turbineneintrittstemperatur T_4 zu halten, muss man mehr thermische Leistung \dot{Q}_{zu} zuführen. Die benötigte thermische Leistung entspricht dem Brennstoffmassenstrom, der der Brennkammer zugeführt wird und im Dehydrierreaktor freigesetzt werden muss. Der freigesetzte Massenstrom im Dehydrierreaktor hängt aber wiederum von der Abgasstemperatur T_6 ab, die durch den Bypass eingestellt wird.

4.2 Modellierung des Moduls Dehydriereinheit

Das Modul Dehydriereinheit (DE) besteht aus dem Wärmeübertrager zur Vorwärmung des LOHC und aus einer Reaktoreinheit [137]. Die Reaktoreinheit wird im Modell im Gegenstrom betrieben und ist in fünf Segmente unterteilt. Um eine polytrope Temperaturführung im Reaktor in der Modellierung zu vermeiden, wird ein Segment in zwei Teile aufgeteilt: Wärmeübergang Abgas-LOHC und adiabate Reaktion im Rohrreaktor. Fochler [44] zeigt, dass fünf Stützstellen das Optimum aus Genauigkeit und Rechenaufwand für die Reaktoreinheit darstellen. Aufgrund der Kopplung der LOHC-Ströme in der Vorwärmung muss das System iterativ gelöst werden. Die Unterteilung in $i = 5$ Segmente erfordert eine weitere innere Iterationsschleife um den Reaktor. Der schematische Aufbau der Dehydriereinheit ist in detaillierter Form in Abbildung 4.2 dargestellt.

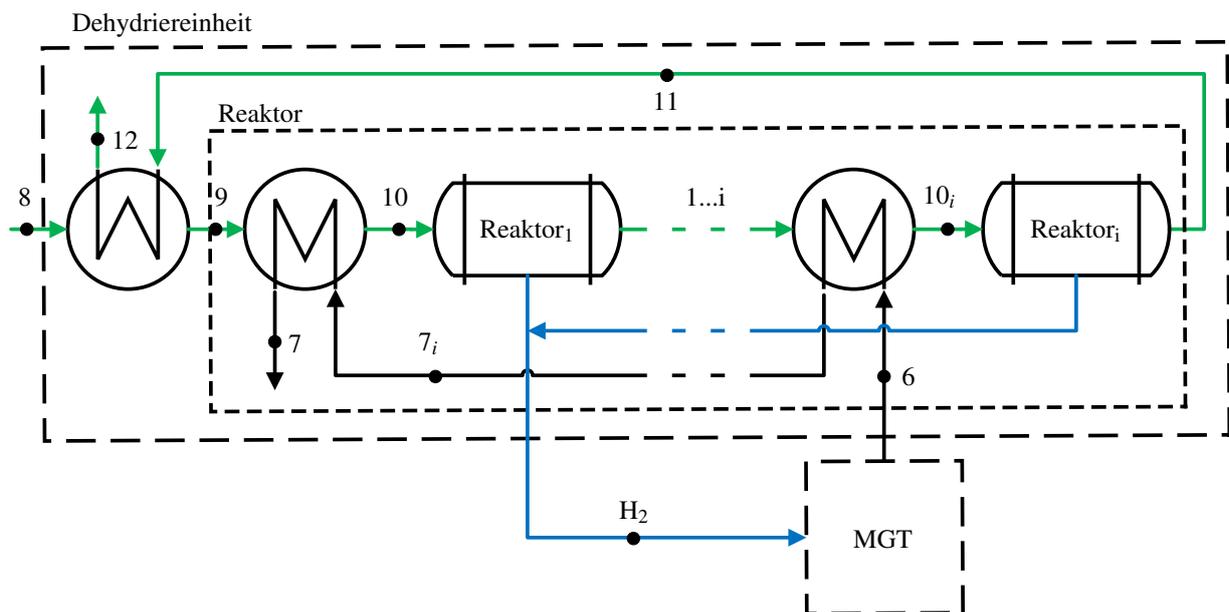


Abbildung 4.2: Detaillierte Darstellung des Prozessschemas der Dehydriereinheit.

Zur Berechnung der Temperatur T_9 des hydrierten LOHC nach der Vorwärmung, der Temperaturen $T_{7,i}$ (Austritt Abgas) und $T_{10,i}$ (Austritt LOHC) im Wärmeübertrager Abgas-LOHC wird ein konstanter Wärmeübertrager-

wirkungsgrad angenommen und in die Energiebilanz eingesetzt (Gleichung (2.4)).

Für die Temperatur T_{11} am Reaktoraustritt muss zunächst der Umsatz X ermittelt werden. Der Umsatz ist implizit in der Gleichung (2.21) für den Rohrreaktor enthalten und kann über eine Nullstellensuche bestimmt werden, wobei die Reaktionsrate r_{LOHC} über den formalkinetischen Ansatz mit Gleichung (2.27) berechnet wird. Für die Reaktortemperatur T_R wird Gleichung (2.30) für die adiabate Temperaturerhöhung eingesetzt. Somit ergibt sich die Gleichung zur Nullstellensuche zu

$$f_0(X) = \int_0^X \frac{dX}{k_0 \exp\left(-\frac{E_A}{R \cdot (T_{10,i} + \Delta T_{ad} X)}\right) (1 - X)} - \tau. \quad (4.6)$$

Die Konstanten für den Arrheniusansatz sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Für den formalkinetischen Ansatz von NEC werden die Daten von Sotoodeh und Smith [106] verwendet. Da für DBT keine Daten für einen globalen Ansatz vorhanden sind, wird mit den Daten von Fikrt et al. [43] ein an den Ansatz von NEC angelehnter Ansatz interpoliert.

Der freigesetzte Wasserstoffmassenstrom im Reaktor $\dot{m}_{Br,R}$ ist unmittelbar abhängig vom Umsatz, und so kann über die Leistungsbilanz am Reaktor schließlich die Temperatur T_{11} am Reaktoraustritt bestimmt werden.

$$T_{11} = \frac{\dot{m}_{LOHC} \cdot \bar{c}_{p,10} (T_{10} - T_{ref}) - \dot{m}_{Br,R} (\bar{c}_{p,Br} (T_{Br} - T_{ref}) + \Delta \bar{h}_{R,10,11})}{\dot{m}_{LOHC} - \dot{m}_{Br,R}} + T_{ref} \quad (4.7)$$

Die Temperatur T_{11} dient der Berechnung der Temperatur T_{12} des dehydrierten LOHC am Austritt der Vorwärmung mittels Energiebilanz analog zu Gleichung

Tabelle 4.1: Konstanten der Reaktionskinetik für die Dehydrierung nach [43, 44, 106].

		NEC	DBT
Aktivierungsenergie	E_A in kJ/mol	120,6	140,1
Stoßfaktor	k_0 in 1/s	$1,123 \cdot 10^{10}$	$1,123 \cdot 10^{10}$
Reaktionsenthalpie	ΔH_R^0 in kJ/mol _{H₂}	50,5	65,5

(4.5). Außerdem wird damit für den neuen Iterationsschritt die Temperatur T_9 neu berechnet, bis die Differenz ΔT_{11} kleiner $1 \cdot 10^{-2}$ K ist. Für die innere Iteration um den Reaktor für $i = 1 \dots 5$ wird eine Toleranz von $\Delta T_{7,i=5}$ kleiner $5 \cdot 10^{-1}$ K gewählt. Das Abbruchkriterium muss an dieser Stelle größer gewählt werden. Durch das exponentielle Verhalten des formalkinetischen Ansatzes ist die größere Toleranz für die numerische Stabilität des Modells ausschlaggebend.

Die Validierung des Modells für die DE gestaltet sich schwierig, da in dieser Leistungsklasse zum Zeitpunkt dieser Arbeit noch keine Daten einer realen Dehydriereinheit dieser Größenordnung existieren. Allerdings kann das Modell auf physikalische Plausibilität für die beiden LOHC überprüft werden. Die Modellierung zeigt, dass der freigesetzte Wasserstoffmassenstrom mit zunehmender Verweilzeit und zunehmender Temperatur des Abgases steigt, bei gleichbleibendem LOHC-Massenstrom. Außerdem kommt die Freisetzungsreaktion im Modell für unterhalb der bei Teichmann [112] angegebenen Mindesttemperatur von 500 K zum Erliegen [44].

4.3 Implementierung des Gesamtprozesses

Für eine Optimierung müssen zunächst die freien Parameter des Systems und die Kriterien, für die ein Optimum gefunden werden soll, bestimmt werden. Hauptaugenmerk der Optimierung liegt dabei auf den Prozessparametern der Mikrogastrurbine. Im Rahmen der Optimierung des Systems MGT-DE werden die Drehzahl der MGT, das Druckverhältnis und der Luftmassenstrom im System konstant gehalten. Die elektrische Leistung wird als annähernd konstant betrachtet (Nennlast). Die freien Parameter im System sind dann:

- das Bypassverhältnis ζ_{BP} ,
- die Verweilzeit des LOHC im Reaktor τ ,
- der eingesetzte hydrierte LOHC-Massenstrom \dot{m}_{LOHC} .

In der Implementierung wird das System an den Schnittstellen getrennt betrachtet. Die Module werden in einer äußeren (MGT) und inneren (DE) Iterations-

schleife berechnet. An den Schnittstellen müssen so Werte für die Abgastemperatur T_6 , welche direkt mit dem Bypassverhältnis zusammenhängt, und für den Brennstoffmassenstrom \dot{m}_{Br} übergeben werden. Der Brennstoff besteht im Rahmen der Optimierung aus reinem Wasserstoff. Abbildung 4.3 zeigt den prinzipiellen Ablauf der Optimierung des Gesamtsystems.

Zunächst werden die Werte für die Schnittstellen, das Bypassverhältnis ζ_{BP} und den Wasserstoffmassenstrom \dot{m}_{Br} für die MGT aus der Population gewählt. Für die innere Optimierung wird die Differenz zwischen dem für den Nennbetrieb benötigten Wasserstoffmassenstrom im MGT-Modul \dot{m}_{Br} und dem freigesetzten Wasserstoffmassenstrom aus der Dehydriereinheit $\dot{m}_{Br,R}$ minimiert. Für den freigesetzten Wasserstoffmassenstrom aus der Dehydriereinheit werden die freien Parameter Verweilzeit im Reaktor τ und eingesetzter hydrierter LOHC-Massenstrom \dot{m}_{LOHC} variiert. Ist eine Lösung der inneren Optimierung gefunden, wird in der äußeren Schleife die gesamte Fitness minimiert. Für die äußere Optimierung wird der in Kapitel 2.3 gezeigte Ablauf *Bestimmen der Fitness - Selektion - Anwendung genetischer Operatoren* angewendet.

Entscheidend für die Güte der Lösung ist die mathematische Beschreibung der Fitnessfunktion. Die dann folgenden Schritte *Selektion* und *Anwendung genetischer Operatoren* sind in der MATLAB Optimization Toolbox implementiert und werden an dieser Stelle nicht näher erläutert. Die grundsätzliche Funktionsweise wurde bereits in Kapitel 2.3.1 gezeigt.

Da mehrere Kriterien und weitere Nebenbedingungen zu berücksichtigen sind, wird die Gesamtfitnessfunktion fit mit einer Summe (Gleichung (2.33)) abgebildet. Darin sind die Zielfunktionen fit_i sowie die Straffunktionen P_i enthalten. Aufgrund der Vielfalt der Kriterien müssen die einzelnen Beiträge zur Fitnessfunktion entsprechend gewichtet werden. Hier gilt es zwischen Bedingungen, die irreparable Schäden am System hervorrufen und den Betrieb unmöglich machen, und Bedingungen, die den Wirkungsgrad verschlechtern oder sich negativ auf Kosten auswirken, zu unterscheiden. Kriterien die gefährlich für das System sind werden entsprechend stärker gewichtet. Das Minimum der Gesamtfitnessfunktion stellt das Optimum dar.

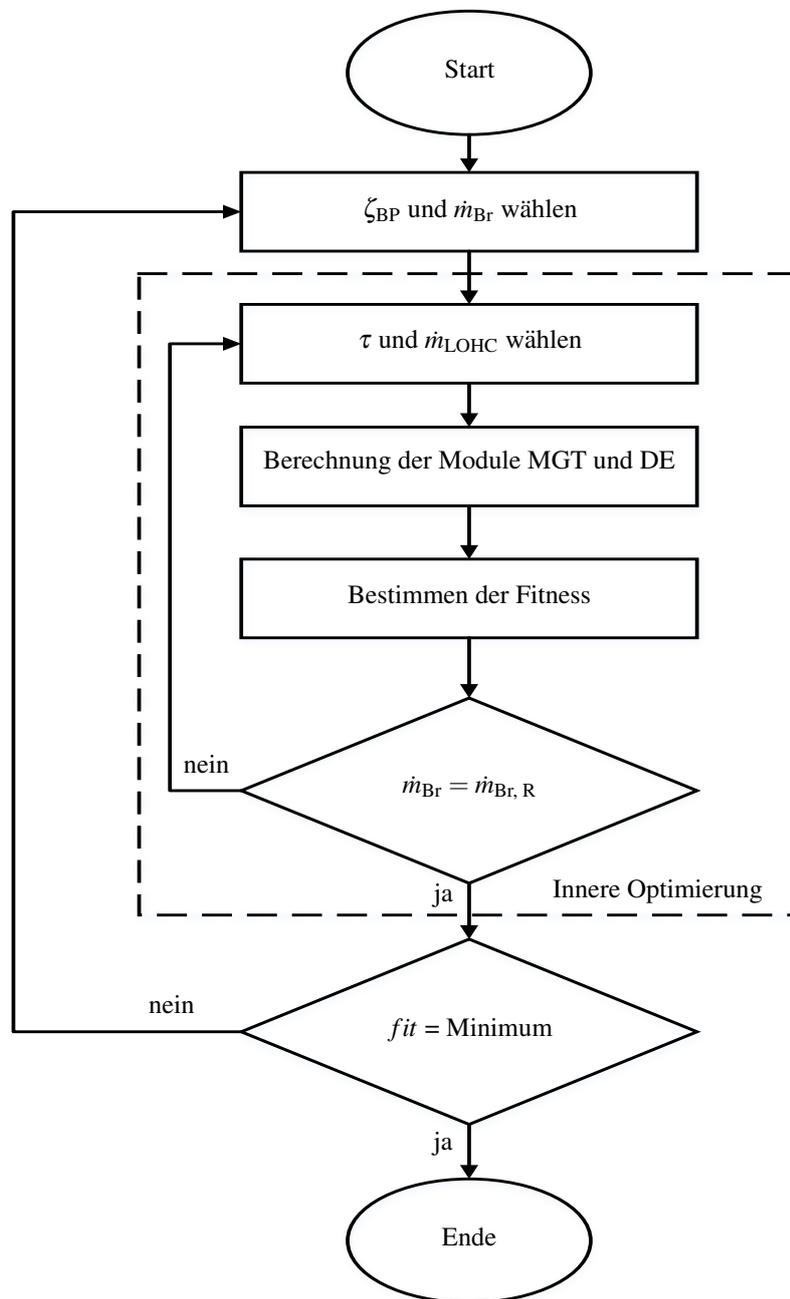


Abbildung 4.3: Flussdiagramm des Optimierungsvorgangs des Gesamtsystems.

Die betrachteten Optimierungskriterien sind:

- Der elektrische Wirkungsgrad η_{el} . Da vorher festgelegt wurde, dass das Minimum der Fitnessfunktion das Optimum darstellt, muss für eine Maximierung des elektrischen Wirkungsgrades der Wert des Wirkungsgrades invertiert werden. Der Beitrag des Wirkungsgrades η_{el} lautet:

$$fit_{\eta} = 100 - (9 + \eta_{el})^2. \quad (4.8)$$

Der Fitnessterm des elektrischen Wirkungsgrades wurde im Rahmen der Invertierung ebenfalls stärker gewichtet, auch wenn ein geringer Wert nicht in erster Linie eine Gefahr für die Mikrogasturbine darstellt. Somit wird sichergestellt, dass der Wirkungsgrad auf das Optimierungsergebnis genügend Einfluss hat, es aber nicht so dominiert wie gefährliche Kriterien.

- Die Differenz zwischen dem benötigten Wasserstoffmassenstrom im MGT-Modul \dot{m}_{Br} und dem freigesetzten Wasserstoffmassenstrom aus der Dehydrierereinheit $\dot{m}_{Br,R}$ soll minimiert werden:

$$fit_{\Delta\dot{m}_{Br}} = \left(100 \cdot \frac{|\dot{m}_{Br} - \dot{m}_{Br,R}|}{\dot{m}_{Br}} \right)^2. \quad (4.9)$$

Die Gleichung (4.9) wurde ebenfalls in der Gewichtung aufgewertet, da bei ungenügender Übereinstimmung der Massenströme kein Betrieb möglich ist. Durch die Multiplikation der Abweichung mit dem Faktor 100 wird dieser Term noch stärker gewichtet als Gleichung (4.8).

Für die folgenden Parameter wird ein Strafterm definiert:

- Die Turbineneintrittstemperatur T_4 soll im Bereich von $T_{4,min} = 1180\text{K}$ $T_{4,max} = 1220\text{K}$ bleiben. Zu hohe Temperaturen führen zu Schäden in der Turbine, zu niedrige verschlechtern den Wirkungsgrad der MGT. Die Formulierung des Strafterms lautet:

$$T_4 > T_{4,max} : P_{T_4} = \left(\max \left[0; (T_4 - T_{4,max}) \cdot \frac{1}{[\text{K}]} \right] \right)^2, \quad (4.10)$$

$$T_4 \leq T_{4,min} : P_{T_4} = \left(\min \left[0; (T_4 - T_{4,min}) \cdot \frac{1}{[\text{K}]} \right] \right)^2. \quad (4.11)$$

- Ebenso darf die Reaktoreintrittstemperatur T_{10} nicht zu hoch sein, um eine thermische Zersetzung des LOHC zu vermeiden. Die Werte für die Maximaltemperaturen entsprechen dem Siedepunkt aus den Tabellen 2.1 und 2.2. Falls die Temperatur T_{10} das Maximum überschreitet, berechnet sich der anteilige Beitrag zur Fitness zu

$$P_{T_{10}} = (T_{10,max} - T_{10})^2 \cdot \frac{1}{[\text{K}^2]}. \quad (4.12)$$

- Für das LOHC NEC gilt außerdem noch die Bedingung, dass die geringste Temperatur des dehydrierten LOHC im System nicht unter $T_{12,min} = 360 \text{ K}$ fallen darf, um eine Kristallisation des dehydrierten LOHC zu vermeiden. Ist dies nicht der Fall ergibt die Straffunktion:

$$P_{T_{12}} = (T_{12,min} - T_{12})^2 \cdot \frac{1}{[\text{K}^2]}. \quad (4.13)$$

- Das Reaktorvolumen wird berücksichtigt, da sowohl die Gesamtmenge des im System eingesetzten LOHC, als auch der Katalysator im System mit Kosten verbunden sind und auch der Bauraum für den Wärmeübertrager und die Reaktoreinheit in einem realen System begrenzt ist. Das Produkt aus Verweilzeit und LOHC-Massenstrom ($\tau \dot{m}_{LOHC}$) ist proportional zum Reaktorvolumen. Für das maximale Produkt wird ein Wert von 15 kg angenommen. Überschreitet es diesen Wert, liefert die Straffunktion

$$P_{V_R} = (\tau \dot{m}_{LOHC} - (\tau \dot{m}_{LOHC})_{max})^2 \cdot \frac{1}{[\text{kg}^2]} \quad (4.14)$$

einen Beitrag zum Betrag der Gesamtfitness. Ist das Produkt kleiner als der maximal zulässige Wert, wird $P_{V_R} = 0$ gesetzt.

Die einzelnen Terme werden zur Berechnung der Gesamtfitness addiert

$$fit = fit_{\eta} + fit_{\Delta \dot{m}_{Br}} + P_{V_R} + P_{T_4} + P_{T_{10}} + P_{T_{12}}. \quad (4.15)$$

Die Strafterme werden ohne weitere Gewichtung übernommen. Ihr Verhalten und die Größenordnung in der sie auftreten, spiegeln die Unterscheidung zwischen gefährlichen und nicht gefährlichen Kriterien wider. Alle Strafterme

bezüglich der Temperaturen, die zwingend einzuhaltende Betriebstemperaturen enthalten, werden als gefährliche Kriterien eingestuft. Der Strafterm für das Reaktorvolumen verschlechtert die Effizienz und erhöht die Kosten, bedroht aber keine Komponenten des Systems.

4.4 Ergebnisse der Optimierung

Mit dem vorgestellten Prozessmodell können für das jeweilige LOHC NEC oder DBT der elektrische Wirkungsgrad η_{el} und die zugehörigen Prozessparameter der Mikrogasturbine bestimmt werden. Sie sind in Tabelle 4.2 aufgelistet. Um das Ergebnis der Optimierung und die begrenzenden Faktoren besser interpretieren zu können, werden die logarithmierten Werte der Fitnessfunktion in einer sogenannten Fitnesslandschaft dargestellt. Diese Darstellung veranschaulicht die Ergebnisse der Optimierung.

Abbildung 4.4 zeigt schematisch eine solche Fitnesslandschaft. Der Fitnesswert wird hier in Abhängigkeit vom Brennstoffmassenstrom \dot{m}_{Br} und Bypassverhältnis ζ_{BP} dargestellt. Zusätzlich werden in dieser Darstellung die Grenzbereiche des möglichen Betriebs des gekoppelten Systems aufgezeigt. Die Grenzbereiche können darin den jeweils hauptsächlichen Begrenzungsfaktoren zugeordnet werden. Bei kleinen Brennstoffmassenströmen und kleinem Bypass limitiert die Reaktionskinetik den Betrieb. Es wird zu wenig Wasserstoff freigesetzt, um die Mikrogasturbine kontinuierlich betreiben zu können. Mit steigendem Brennstoffmassenstrom, aber konstantem Bypassverhältnis, begrenzt für kleine Bypassverhältnisse die Turbineneintrittstemperatur T_4 den Betrieb. Der Term P_{T_4} dominiert den Fitnesswert. Für große Brennstoffmassenströme und großen Bypass erhöht der Beitrag des Terms der Reaktoreintrittstemperatur $P_{T_{10}}$ den Fitnesswert. Der technisch mögliche Bereich wird auch zu großen Bypassverhältnissen hin durch den Wirkungsgrad begrenzt. Der Betrieb ist hier zwar möglich, aber nicht effizient, so dass dies nicht in die Kategorie der gefährlichen Kriterien fällt, die nicht verletzt werden dürfen. Daher wird dieser Einfluss auch in der Fitnesslandschaft weniger deutlich.

Tabelle 4.2: Ergebnisse der Optimierung für die beiden LOHC NEC und DBT.

		T100+NEC	T100+DBT
Bypassverhältnis	ζ_{BP}	0,10	0,38
Wasserstoffmassenstrom	\dot{m}_{Br} in g/s	2,93	3,53
LOHC-Massenstrom	\dot{m}_{LOHC} in g/s	241	244
Verweilzeit im Reaktor	τ in s	61	58
Brennkammereintrittstemperatur	T_3 in K	861	759
Turbineneintrittstemperatur	T_4 in K	1222	1197
Abgastemperatur	T_6 in K	560	644
Elektrischer Wirkungsgrad MGT	η_{el} in %	25,9	20,3

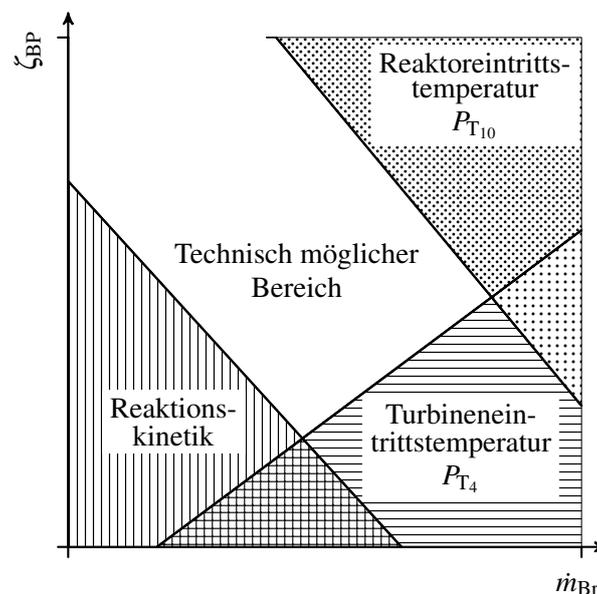


Abbildung 4.4: Einfluss der Randbedingungen in der Fitnesslandschaft.

Die Abbildungen 4.5 und 4.6 zeigen die berechneten Fitnesslandschaften für die LOHC NEC und DBT jeweils gekoppelt mit der Mikrogasturbine T100. Ein offensichtlicher Unterschied zwischen NEC und DBT ist das Bypassverhältnis ζ_{BP} des Optimums. Da die Reaktionsenthalpie für die Freisetzungsreaktion von DBT höher liegt, wird im Vergleich zu NEC ein größerer Abgasenthalpiestrom für die endotherme Reaktion benötigt. Der Abgasenthalpiestrom hängt direkt von der Abgastemperatur T_6 ab, die durch das Bypassverhältnis eingestellt wird. Ein höherer Bypass bedeutet auch gleichzeitig, dass in der Mikrogasturbine

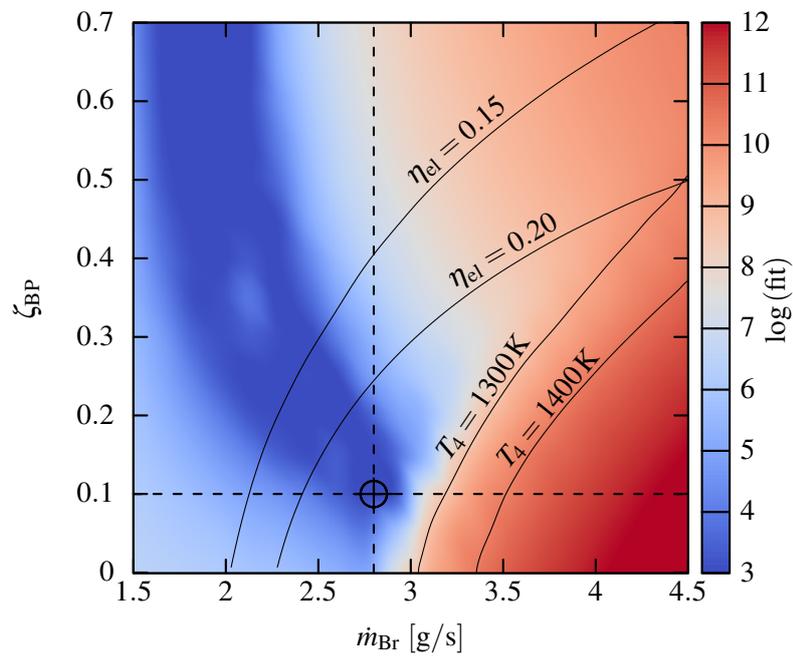


Abbildung 4.5: Werte der Fitnessfunktion für NEC in Abhängigkeit von Bypassverhältnis und Brennstoffmassenstrom der MGT. Der Kreis kennzeichnet die Lage des Optimums.

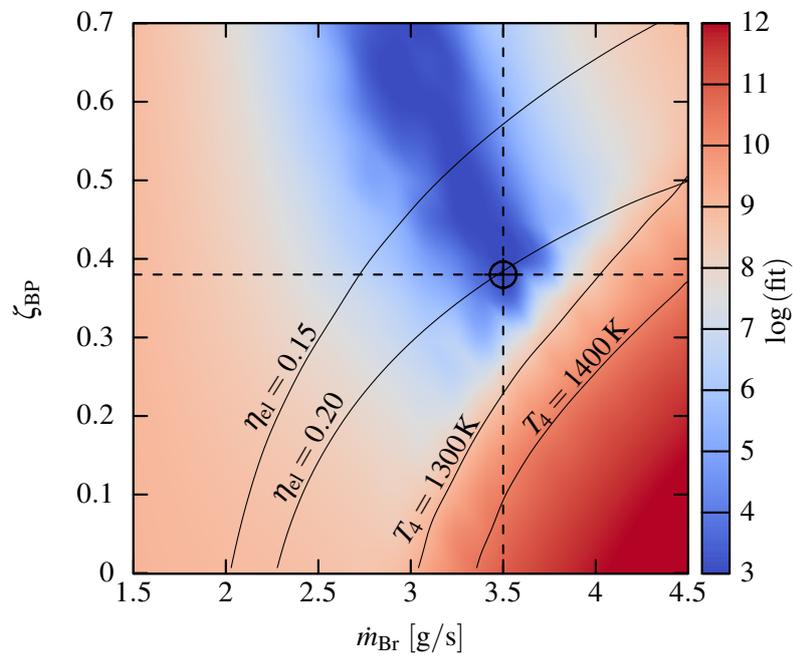


Abbildung 4.6: Werte der Fitnessfunktion für DBT in Abhängigkeit von Bypassverhältnis und Brennstoffmassenstrom der MGT. Der Kreis kennzeichnet die Lage des Optimums.

ein größerer Wasserstoffmassenstrom \dot{m}_{Br} benötigt wird, um die durch den Bypass bedingte geringere Brennkammereintrittstemperatur T_3 mit der Zufuhr von höherer thermischer Leistung zu kompensieren. Deshalb ist auch der benötigte Wasserstoffmassenstrom \dot{m}_{Br} für das System T100+DBT größer und der elektrische Wirkungsgrad geringer.

Die Verweilzeit τ im Reaktor und der benötigte LOHC-Massenstrom \dot{m}_{LOHC} sind für beide LOHC ähnlich. Das ist ein Hinweis darauf, dass die höhere Speicherdichte von DBT im Vergleich zu NEC unter den gezeigten Bedingungen den erhöhten Brennstoffbedarf ausgleichen kann. Um den höheren Wasserstoffmassenstrom für die Konfiguration T100+DBT bereitzustellen, erhöht sich der Massenstrom des LOHC nur unwesentlich im Vergleich zur Konfiguration T100+NEC.

Für das NEC ist der elektrische Wirkungsgrad der Turbine η_{el} durch den geringeren Bypass um 5 % höher. Die Ergebnisse zeigen, dass beide LOHC Varianten grundsätzlich geeignet sind, um das betrachtete System aus MGT+DE zu betreiben. Die Verwendung von NEC bietet allerdings einen deutlichen Vorteil bezüglich des elektrischen Wirkungsgrades. Für die Freisetzung des benötigten Wasserstoffmassenstroms aus DBT ist die Abgastemperatur zu niedrig und kann nur durch einen deutlichen Eingriff in den Mikrogasturbinenprozess ausgeglichen werden.

Abschließend wird noch die Sensitivität des Modells bezüglich der freien Parameter ζ_{BP} und \dot{m}_{LOHC} beurteilt. Diese beiden Parameter eignen sich auch für eine dynamische Regelung im Betrieb. Die Verweilzeit geht indirekt in die Untersuchung mit ein, da während des Betriebs das Reaktorvolumen nicht verändert werden kann. Abbildung 4.7 zeigt am System T100+NEC exemplarisch den Einfluss dieser Parameter. Gezeigt ist der freigesetzte Wasserstoffmassenstrom der Dehydriereinheit über dem LOHC-Massenstrom für verschiedene Bypassverhältnisse. Kurven die nicht vollständig dargestellt sind, verletzen an dieser Stelle ein gefährliches Kriterium. Es zeigt sich, dass Schwankungen des LOHC-Massenstroms bei gleichem Bypassverhältnis einen geringeren Einfluss auf den freigesetzten Wasserstoffmassenstrom haben, als die Schwankungen im Bypassverhältnis. Schwankungen im Bypassverhältnis bedeuten immer Schwankungen in der Abgastemperatur, die direkt zu veränderten freigesetzten Massenströmen

führen. Daraus kann geschlossen werden, dass das Bypassverhältnis für einen stabilen Betrieb dynamisch veränderbar sein muss. So kann im stationären Betrieb eine gleichbleibende Abgastemperatur durch Regelung gewährleistet werden.

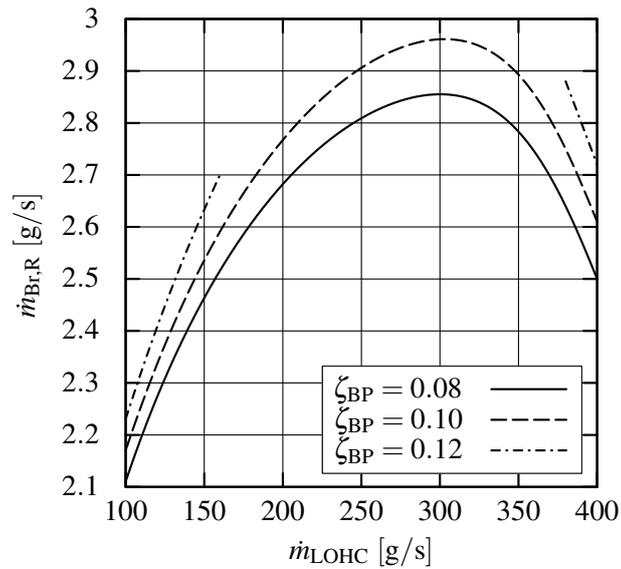


Abbildung 4.7: Freigesetzter Brennstoffmassenstrom aus dem Reaktor für verschiedene Bypassverhältnisse, aufgetragen über den LOHC-Massenstrom (NEC).

5 Voruntersuchungen zur verdünnten Verbrennung in der VZPM-Brennkammer

Für die in Kapitel 4 bestimmten Prozessparameter der Mikrogasturbine soll im Rahmen dieser Arbeit ein geeignetes Brennkammerkonzept entwickelt werden. Dafür werden mit der VZPM-Brennkammer in diesem Kapitel Voruntersuchungen durchgeführt. Zuerst werden der experimentelle Aufbau und die Messtechnik gezeigt sowie die zugehörigen experimentellen Untersuchungen zur Betriebscharakteristik der VZPM-Brennkammer. Da die Brennkammer im Experiment für optische Messtechnik nur sehr eingeschränkt zugänglich ist, werden für spätere Untersuchungen geeignete numerische Modelle entwickelt und in diesem Kapitel validiert. Für das globale Emissionsverhalten wird ein einfaches Reaktornetzwerk in Cantera erstellt. Das Strömungsfeld in der Brennkammer wird mit numerischer Strömungssimulation in ANSYS Fluent 14.5 untersucht.

5.1 Experimenteller Aufbau

Der vorgestellte experimentelle Aufbau dient als Basis für die in diesem Kapitel und in Kapitel 6 durchgeführten Experimente, deshalb werden die Anforderungen an den Versuchsaufbau der Voruntersuchungen und des weiterentwickelten Brennkammerkonzepts an dieser Stelle zusammengefasst. Für die Voruntersuchungen dieses Kapitels sind Luftmassenströme bis 90 g/s und Vorwärmtemperaturen bis 790 K nötig.

Die Randbedingungen für die Experimente in Kapitel 6 ergeben sich aus den Betriebsbedingungen der Mikrogasturbine. Für das Experiment werden diese auf Umgebungsbedingungen skaliert. Die Skalierung der Bedingungen erfolgt über

das relative Druckverhältnis, damit die Geschwindigkeiten in der Brennkammer konstant bleiben:

$$u_{Exp} = u_{MGT}. \quad (5.1)$$

Zusammen mit den Umgebungsbedingungen des Experiments und dem Druck in der Brennkammer aus Tabelle 1.2 ergibt sich ein Skalierungsfaktor von

$$\dot{m}_{Exp} = \frac{P_{Exp}}{P_{MGT}} \cdot \dot{m}_{MGT} = 0,2133 \cdot \dot{m}_{MGT} \quad (5.2)$$

für die Massenströme im Experiment. Tabelle 5.1 fasst die Randbedingungen aus der T100 und den gekoppelten Konfigurationen T100+DBT und T100+NEC zusammen. Das experimentelle Aufbau muss im Maximum 170,67 g/s Luft mit den angegebenen Vormwärmtemperaturen zur Verfügung stellen. Aus den angegebenen benötigten thermischen Leistungen \dot{Q}_{zu} leiten sich die jeweiligen Brennstoffmassenströme sowie die Luftzahlen der Betriebspunkte ab.

Tabelle 5.1: Skalierte Randbedingungen der Nennlastbetriebspunkte der betrachteten Konfigurationen der MGT T100.

		T100	T100+NEC	T100+DBT
Maximaler Luftmassenstrom	\dot{m}_L in g/s	170,67	170,67	170,67
Brennkammereintrittstemperatur	T_3 in K	894	861	759
Thermische Leistung Nennlast	\dot{Q}_{zu} in kW	71,04	75,07	90,45
Globale Luftzahl Erdgas	λ	7,0	6,6	5,5
Globale Luftzahl Wasserstoff	λ	8,4	8,0	6,6

5.1.1 Experimenteller Aufbau der VZPM-Brennkammer

Der Versuchsaufbau besteht im Wesentlichen aus den drei Elementen Lufterhitzer, Brennkammer und Abgaskanal und ist in Abbildung 5.1 schematisch dargestellt. Im Lufterhitzer wird die Verbrennungsluft auf die entsprechende Brennkammereintrittstemperatur elektrisch vorgeheizt. Über wärmeisolierte Zuleitungen wird die vorgeheizte Luft im Wirbelvormischinjektor mit Brennstoff gemischt und in die Brennkammer eingedüst. Das Abgas strömt über den Abgaskanal in den Kamin.

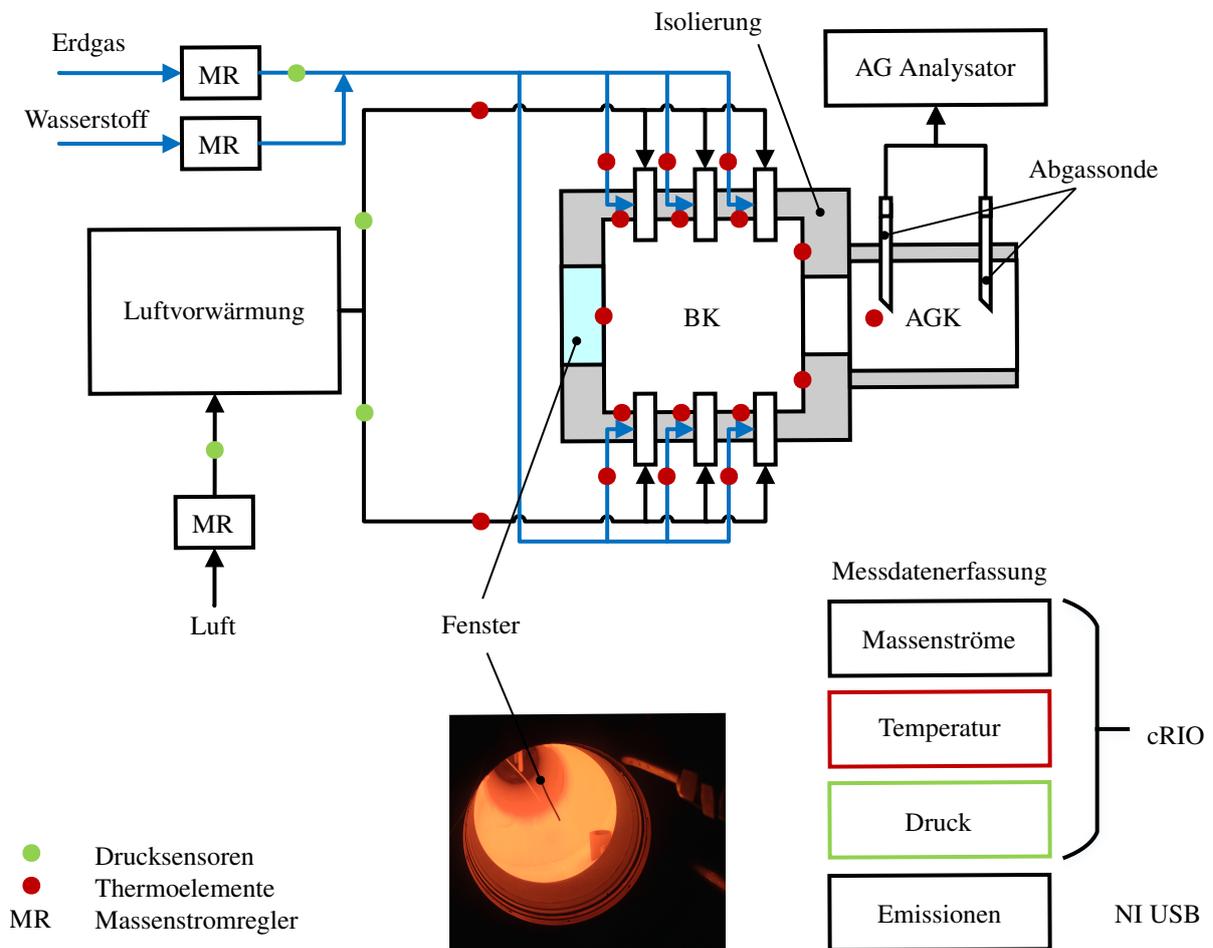


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung der Medienströme im Versuchsaufbau.

Die Brennkammer ist in Abbildung 5.2 im Detail dargestellt. Sie besteht aus drei zylindrischen Ringen, die jeweils mit zwei Aussparungen für die tangentielle Frischgaszufuhr sowie mit zwei Schlitten für die seitlichen optischen Zugänge versehen sind. Abgeschlossen wird der segmentierte Zylinder stromauf mit einem Deckel, in dem der Pilotbrenner sowie ein Fenster für den frontalen optischen Zugang eingebaut sind. Stromab wird die Brennkammer mit einem Deckel und einem Flächensprung an den Abgaskanal angebunden. Die Bauteile Ringe, Deckel und Flächensprung bestehen aus gesintertem Siliziumcarbid (SSiC), das sich durch seine hohe Temperaturbeständigkeit, gute Temperaturwechselbeständigkeit und geringe Wärmeausdehnung auszeichnet (Hersteller: H.C. Starck Ceramics GmbH & Co. KG). Über die Wirbelvormischinjektoren

wird das Frischgas tangential in die Brennkammer eingebracht. Es ist pro Ring je ein Paar verbaut, das über den jeweiligen Verteiler mit vorgewärmter Luft und Brennstoff versorgt wird. Umhüllt ist die Brennkammer mit zwei Schichten aus Isoliermaterial der Firma Duotherm Isoliersysteme GmbH (innen: duoform 1430s, außen: duoform 1100ST). Eine Außenhülle aus hochwarmfestem Edelstahl schließt die Brennkammer luftdicht ab. Die Isolationsschichten sind elementar für das Verbrennungskonzept. Da möglichst heißes Abgas in die Reakti-

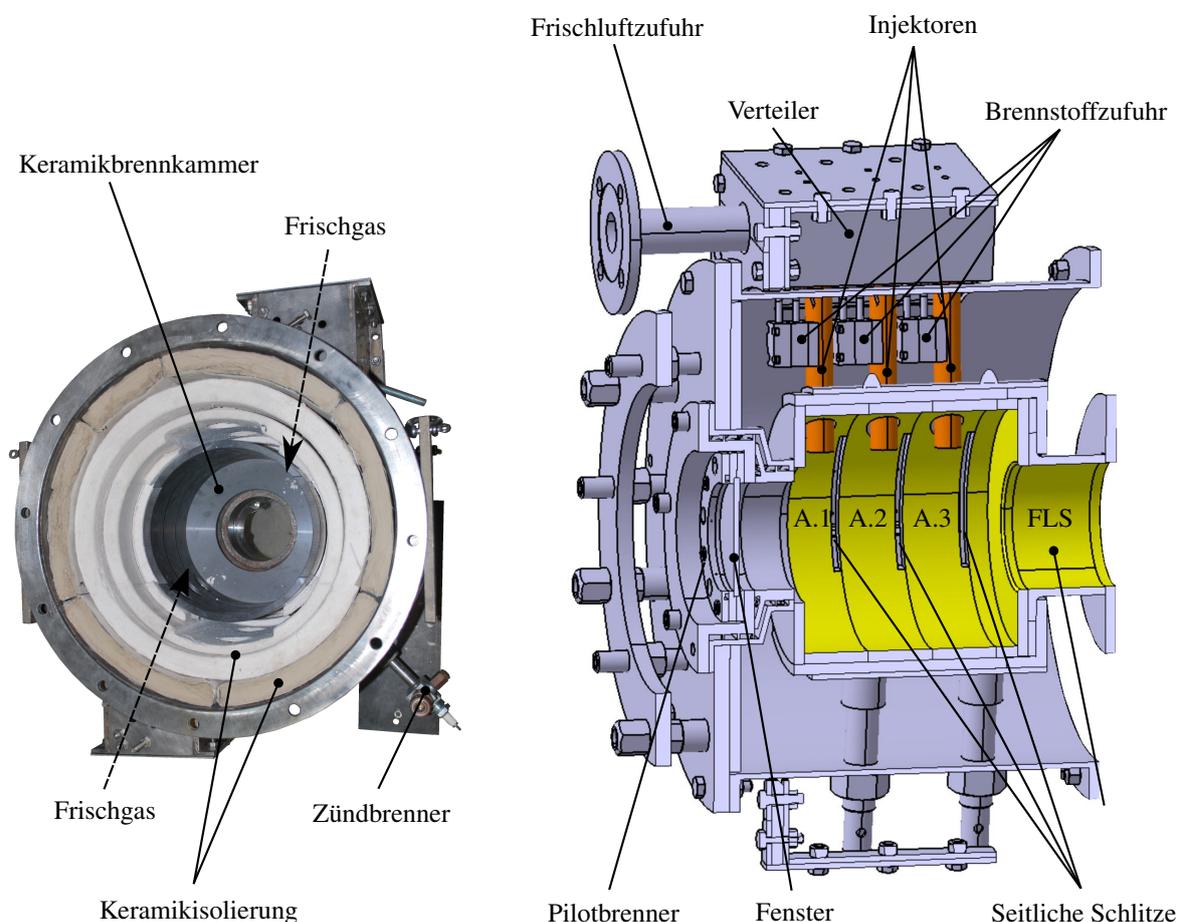


Abbildung 5.2: Abbildung der VZPM-Brennkammer und Schnitt durch das Volumenmodell (nach [83]).

onszone rezirkuliert werden soll, muss der Verlustwärmestrom an die Umgebung auf ein Minimum reduziert werden. Allerdings schränkt die Isolierung die optische Zugänglichkeit enorm ein. Es bleiben lediglich die seitlichen Schlitze sowie

ein frontales Fenster zur optischen Überwachung und zum Einsatz von optischen Messtechniken [15, 20, 57].

Der Abgaskanal ist innen ebenfalls mit einer Isolationsschicht ausgekleidet. Aufgrund der Zyklonströmung ist nicht auszuschließen, dass sich Rückströmgebiete im Abgaskanal ausbilden und dadurch abgekühltes Abgas zurück in die Brennkammer gelangt. Im Abgaskanal selbst stehen zwei Zugänge zur Probenentnahme des Abgases zur Verfügung. Abgeschlossen wird der Kanal mit einer Blende, deren Auslassdurchmesser dem Anschlussdurchmesser der Turbine der Mikrogasturbine entspricht.

Tabelle 5.2: Abmessungen der Versuchsbrennkammer.

	Maße in mm
Innendurchmesser Keramikbrennkammer	220
Innendurchmesser Außenhülle Edelstahl	430
Länge Brennkammer	200
Höhe Ring	60
Breite Schlitz der seitlichen optischen Zugänge	7
Innendurchmesser Injektor (Auslass)	20
Innendurchmesser Flächensprung	115
Länge Flächensprung	80
Länge Abgaskanal	700
Durchmesser Auslass Abgaskanal	90
Position 1 Abgassonde: Ende Flächensprung - Sonde	185
Position 2 Abgassonde: Ende Flächensprung - Sonde	590
Innendurchmesser Abgassonde	5
Winkelposition Injektor	30°

In Tabelle 5.2 sind die wichtigsten Abmessungen der Versuchsbrennkammer aufgeführt. Die Tabelle 5.3 zeigt die möglichen Betriebsbereiche der verwendeten Medien Luft, Wasserstoff und Erdgas. Zur Nomenklatur sei an dieser Stelle noch erwähnt, dass im folgenden die einzelnen Ringe der Brennkammer als Ebenen bezeichnet werden und in Richtung stromab mit A.1-A.3 durchnummeriert sind. Die Abmessung des Wirbelvormischinjektors sind analog zu den Untersuchungen von Bauer et al. [12] gewählt.

Tabelle 5.3: Betriebsbereiche der Medienströme.

		Betriebsbereich
Massenstrom Luft	\dot{m}_L in g/s	50-300
Maximale Vorwärmtemperatur Luft	T_3 in K	900
Massenstrom Wasserstoff	\dot{m}_{H_2} in g/s	0,07-0,7
Minimale Luftzahl Wasserstoff	λ	2,0
Massenstrom Erdgas	\dot{m}_{NG} in g/s	0,35-3,5
Minimale Luftzahl Erdgas	λ	< 1

5.1.2 Steuerung, Messtechnik und Messdatenerfassung

Die Massenstromregler, sowie die zugehörigen Magnetventile werden über ein *Compact Reconfigurable Input/Output* System (cRIO) von National Instruments angesteuert. Das cRIO-System verfügt über einen eigenen Prozessor, auf dem das in LabView programmierte Programm zur Steuerung und Messdatenerfassung läuft. Über eine Netzwerkverbindung werden die Parameter gesetzt bzw. die erfassten Messdaten ausgelesen. Dazu zählen die Werte der Drucksensoren, der Massenstromregler, der Ventilstellungen und die der Thermoelemente des Typs K, die im Versuchsaufbau verbaut sind. Diese dienen der Überwachung des Verbrennungsprozesses, insbesondere die Temperatursensoren die zwischen Keramikbrennkammer und der ersten Schicht der Isolierung positioniert sind. Das Steuer- und Messprogramm läuft mit einer Schleifendauer von 500 ms. Für einen Messpunkt werden mindestens 120 Durchläufe ($\hat{=}$ 2 min) aufgezeichnet. Ein Messpunkt, der aufgezeichnet wird, gilt dann als stationär, wenn die Thermoelemente zwischen Keramikbrennkammer und erster Isolierungsschicht einen Temperaturgradienten kleiner 1 K/min anzeigen. Mit dem Thermoelement das in der Brennkammer direkt vor dem Fenster platziert ist, kann die magere Verlöschgrenze bestimmt werden. Verlöscht die Reaktion in der Brennkammer, ist dies durch einen Temperatursprung in diesem Thermoelement sichtbar.

Zur Messung der Stickoxidwerte wird die Abgasanalyseanlage *Advance Optima 2000* der Firma ABB verwendet. Mit einer ungekühlten Keramiksonde, deren Spitze in einem Winkel von 45° angeschnitten ist, wird das Abgas kontinuierlich abgesaugt. Über einen beheizten Schlauch, der auf 120°C temperiert

ist, um das Kondensieren des Wasserdampfs im Abgas zu verhindern, gelangt es zum Analysator. Der Analysator besteht aus drei Modulen. Die Komponenten im Abgas, die gemessen werden können, sowie die wichtigsten Daten der Analysatormodule sind in Tabelle 5.4 zusammengefasst. Die Messdaten des Abgasanalysators werden nicht über das cRIO-System ausgelesen, sondern separat mit dem Modul NI USB 6008 von National Instruments erfasst. Am analogen Ausgang des Analysators wird für jedes Analysatormodul ein Strom im Bereich von 4 mA bis 20 mA ausgegeben. Während des Kalibriervorgangs der Module speichert ein Kalibrierprogramm in LabView den äquivalenten Strom der Null- und Endpunkte. Dadurch kann eine kontinuierliche Anzeige der Emissionswerte in die Messdatenerfassung integriert werden. Aus den Abgaswerten kann so auch die Luftzahl aus O_2 und bei Erdgas auch aus CO_2 bestimmt werden. Die berechneten Luftzahlen aus dem Abgas dienen ebenfalls zur Überwachung des Experiments und zur Überprüfung der Validität der Messdaten. Für die Messung der Abgaswerte wurde immer die Messposition 1 der Abgassonde aus Tabelle 5.2 verwendet.

Die Auswertung der Messungen erfolgt in MATLAB. Aus den Rohdaten wird zunächst das arithmetische Mittel gebildet. Mit den Thermoelementen in den Zuleitungen der Medienströme und dem Ist-Wert des Massenstroms wird die

Tabelle 5.4: Module des Abgasanalysators mit den jeweiligen Kalibrierbereichen, Kalibriermethoden und Messbereichen [2, 15, 83].

	CO [ppm]	CO ₂ [vol%]	O ₂ [vol%]	NO [ppm]	NO ₂ [ppm]
Modulname	URAS 26	URAS 26	MAGNOS 206	LIMAS 11	LIMAS 11
Kalibrierbereich	0-50	0-30	0-25	0-50	0-50
Konzentration Endpunkt	40,3	19,54	17,25	40	36,4
Endpunktgas	Prüfgas	Küvette	Prüfgas	Prüfgas	Küvette
Nullpunktgas	5.5 N ₂	5.5 N ₂	5.5 N ₂	5.5 N ₂	5.5 N ₂
Messbereich	0-50	0-30	0-25	0-50	0-10
Linearitätsabweichung	≤ 0,5	≤ 0,3	≤ 0,125	≤ 0,5	≤ 0,1
Zustand des Abgases	trocken	trocken	trocken	feucht	feucht

tatsächliche adiabate Flammentemperatur T_{ad} des Betriebspunktes mit Hilfe der NASA-Polynome bestimmt. Dadurch kann neben der Luftzahl λ auch die Vorwärmtemperatur T_V mit einbezogen werden. Alle in dieser Arbeit angegebenen Emissionswerte für NO und NO₂ sind auf einen Restsauerstoffgehalt von 15 vol% normiert.

5.2 Experimentelle Ergebnisse der VZPM-Brennkammer

Die VZPM-Brennkammer wurde zuvor von Brückner-Kalb [20] untersucht. Deshalb werden zur Validierung des experimentellen Aufbaus der VZPM-Brennkammer die Stickoxidemission mit Werten aus [21] verglichen. Für die Messungen wird die adiabate Flammentemperatur $T_{ad,A}$ bei konstanter Vorwärmtemperatur schrittweise reduziert, bis die magere Verlöschgrenze erreicht ist. Bild 5.3 zeigt die gemessenen NO_x-Werte und die Ergebnisse von Brückner-Kalb in Abhängigkeit von der adiabaten Flammentemperatur $T_{ad,A}$ im Betrieb mit Erdgas. Der qualitative Verlauf der Emissionen ist gleich. Die NO_x-Werte sind im Vergleich höher als in [21] und der Betriebsbereich streckt sich zu niedrigeren Flammentemperaturen $T_{ad,A}$. Diese Abweichungen können durch Ungenauigkeiten in der Bestimmung der adiabaten Flammentemperatur zustande kommen. Durch die Position der Thermoelemente im System kann die adiabate Flammentemperatur abweichen. Außerdem wurde ein anderer NO_x-Anlaysator verwendet, dessen Messbereich im Vergleich zur Arbeit von Brückner-Kalb größer ist. Durch den größeren Messbereich wird der zulässige Bereich der Messgenauigkeit größer. Ein weiterer Unterschied im experimentellen Aufbau ist die Isolierung um die Brennkammer. Für diesen Aufbau ist eine Isolierschicht mit besserer Isoliereigenschaft als im Experiment von [20] verbaut. Dadurch ist der Wärmeverlust in der Brennkammer geringer. Die höhere mittlere Brennkammertemperatur führt zwar zu höheren NO_x-Emissionen, allerdings erweitert sich der Betriebsbereich hin zu mageren Betriebspunkten.

Diagramm 5.3 zeigt auch, dass der Einfluss des Luftmassenstroms \dot{m}_L auf die NO_x-Emissionen im Betrieb mit Erdgas sehr gering ist. Fasst man ungeachtet des unterschiedlichen Massenstroms exemplarisch an den 3 Punkten 1500 K, 1550 K

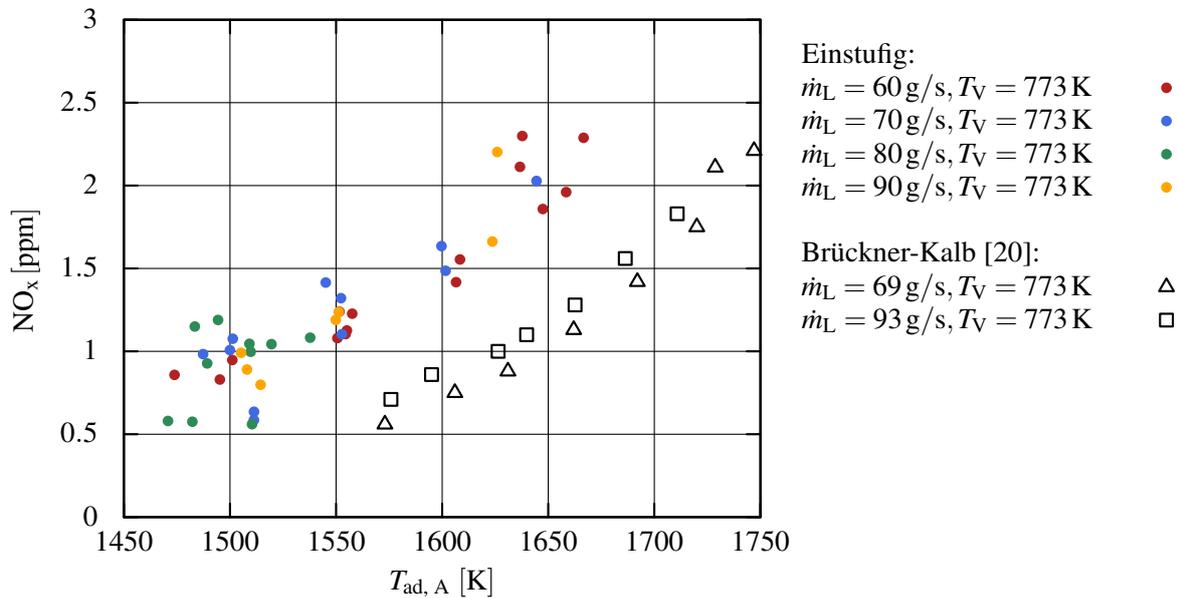


Abbildung 5.3: Vergleich der Experimente für Erdgas mit Daten von Brückner-Kalb [20].

und 1600 K alle Messwerte aus dem Diagramm 5.3 bei gleicher T_{ad} zusammen und berechnet die Standardabweichung vom Mittelwert σ_x , ergeben sich für diese Werte zwischen $\pm 0,1$ ppm bis 0,2 ppm. Die Anzahl der Stichproben liegt zwischen 4 und 10. Damit ergibt sich, dass mit einer Wahrscheinlichkeit von 99 % die Werte im Bereich von $\pm 0,1$ ppm bis 0,4 ppm des Mittelwerts an diesen Punkten liegen. In Anbetracht der Messgenauigkeit der Abgasanalyseanlage sind die Messdaten also gut reproduzierbar.

Das Diagramm 5.4 zeigt den Einfluss des volumenbezogenen Wasserstoffgehalts γ auf die Emissionen und den Betriebsbereich. Für die Messreihen mit $\gamma = 0$ bis 0,7 wurde die Messreihe immer bis zur mageren Verlöschgrenze gefahren. Erwartungsgemäß erweitert sich der Betriebsbereich durch die Wasserstoffzugabe hin zu mageren Bedingungen. Ab einem Gehalt von 50 vol% H₂ ($\gamma = 0,5$) zeigt sich ein Einfluss des Wasserstoffs auf die NO_x-Emissionen. Bei 100 vol% H₂ ($\gamma = 1$) liegen die NO_x-Werte deutlich höher. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die Mischungslänge in der Brennkammer kürzer wird. Aufgrund der erhöhten Reaktivität von Wasserstoff kann weniger Abgas vor der Reaktionszone in den Frischgasstrahl eingemischt werden. Dadurch können Ungemischtheiten im Frischgasstrahl, bestehend aus Brennstoff und Luft, nur mehr in geringerem Maß abgebaut werden. Die lokale Temperatur erhöht sich in der Reaktionszone,

was zu einer größeren NO_x -Bildungsrate führt. Die absoluten Werte der NO_x -Emissionen für $\gamma = 1$ liegen aber immer noch deutlich unterhalb der Grenze von 10 ppm für die verdünnte Verbrennung von Wasserstoff nach Villani et al. [122].

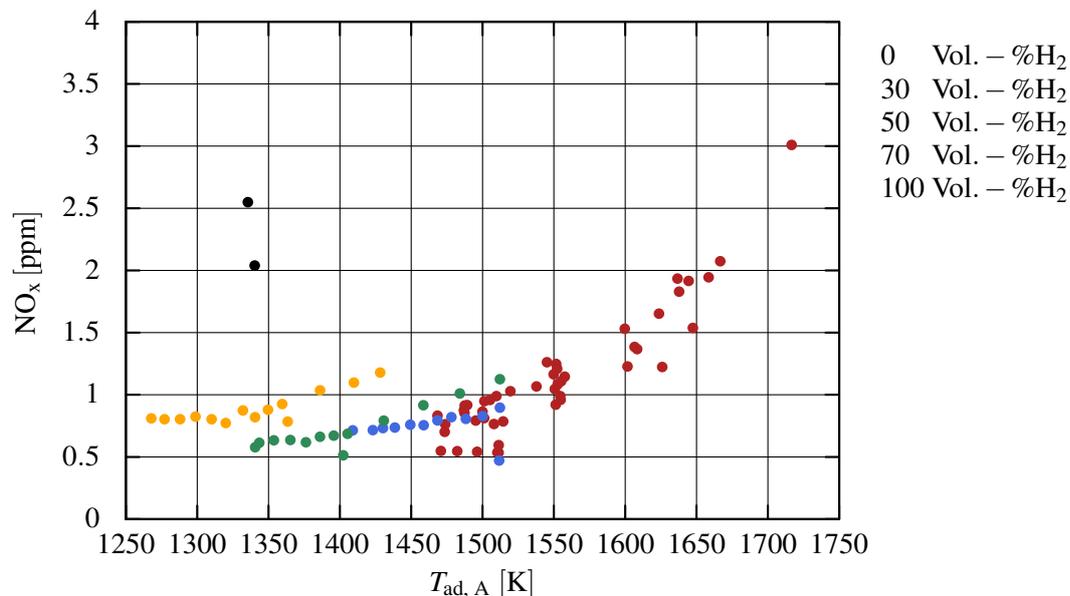


Abbildung 5.4: NO_x -Emissionen in Abhängigkeit von $T_{\text{ad,A}}$ ($T_{\text{V}} = 773 \text{ K}$, $\gamma = 0 \dots 1$).

5.3 Reaktornetzwerkmodellierung der verdünnten Verbrennung

In diesem Abschnitt wird ein einfaches Reaktornetzwerkmodell in Cantera vorgestellt. Zur Modellierung der Verbrennungsreaktion wird der GRI-3.0 Mechanismus [103] verwendet, weil dieser einen NO_x -Bildungsmechanismus und die Spezies für die Wasserstoff- und Erdgasverbrennung beinhaltet. In der Literatur wird die verdünnte Verbrennung mit der Annahme eines CSTR modelliert [59, 89]. Abbildung 5.5 zeigt den prinzipiellen Aufbau des Reaktornetzwerkmodells. Zunächst werden der Brennstoff- und der Luftmassenstrom perfekt vorgemischt, bevor sie im CSTR reagieren. Das Volumen des Reaktors ist so gewählt, dass es dem der Brennkammer im Experiment entspricht. Über die Wand des Reaktors kann außerdem ein Verlustwärmestrom berücksichtigt werden. Am Auslass wird die Abgaszusammensetzung ausgelesen und entsprechend

den Messungen im Experiment auf einen Sauerstoffgehalt von 15 vol% normiert.

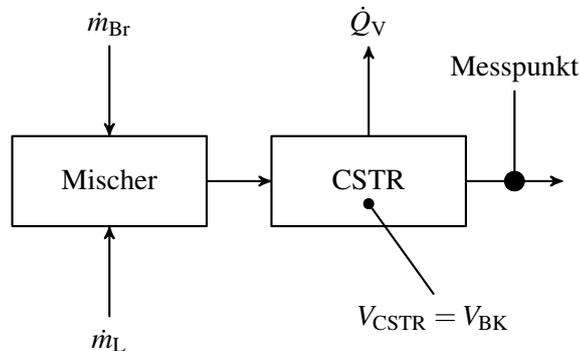


Abbildung 5.5: Reaktornetzwerkmodell der VZPM-Brennkammer.

Abbildung 5.6 vergleicht die Daten aus Abbildung 5.4 mit den berechneten NO_x -Emissionen aus dem Modell am zugehörigen Betriebspunkt. Der Wärmeverlust durch Wärmeleitung und Strahlung wird mit $0,075 \cdot \dot{Q}_{\text{zu}}$ angenommen. Abschätzungen aus dem Experiment zeigen, dass sich der Wärmeverlust im Bereich 5 % bis 10 % von \dot{Q}_{zu} bewegt. Für Erdgas stimmen die berechneten Werte mit den Messungen sehr gut überein. Die NO_x -Werte aus Experiment und Modell steigen exponentiell mit T_{ad} an. Außerdem sind die berechneten Werte, wie auch schon im Experiment, nur in geringem Maße ($< 0,1$ ppm) vom Luftmassenstrom abhängig. T_{ad} ist bei Erdgas der alleinige Parameter, der die NO_x -Emissionen der VZPM-Brennkammer bestimmt.

Mit zunehmenden Wasserstoffgehalt steigt die Abweichung der NO_x -Werte zwischen Modell und Experiment. Durch die höhere Reaktivität von Wasserstoff dominiert das chemische Zeitmaß nicht mehr allein das Emissionsverhalten der Brennkammer. Für den Betrieb mit beiden Brennstoffen kann das Modell nur zur Aussage, in welchem Maß die Verhältnisse innerhalb der Reaktionszone von den idealisierten Bedingungen eines CSTR abweichen, verwendet werden. Für Erdgas sind die Ergebnisse der NO_x -Vorhersage sehr gut.

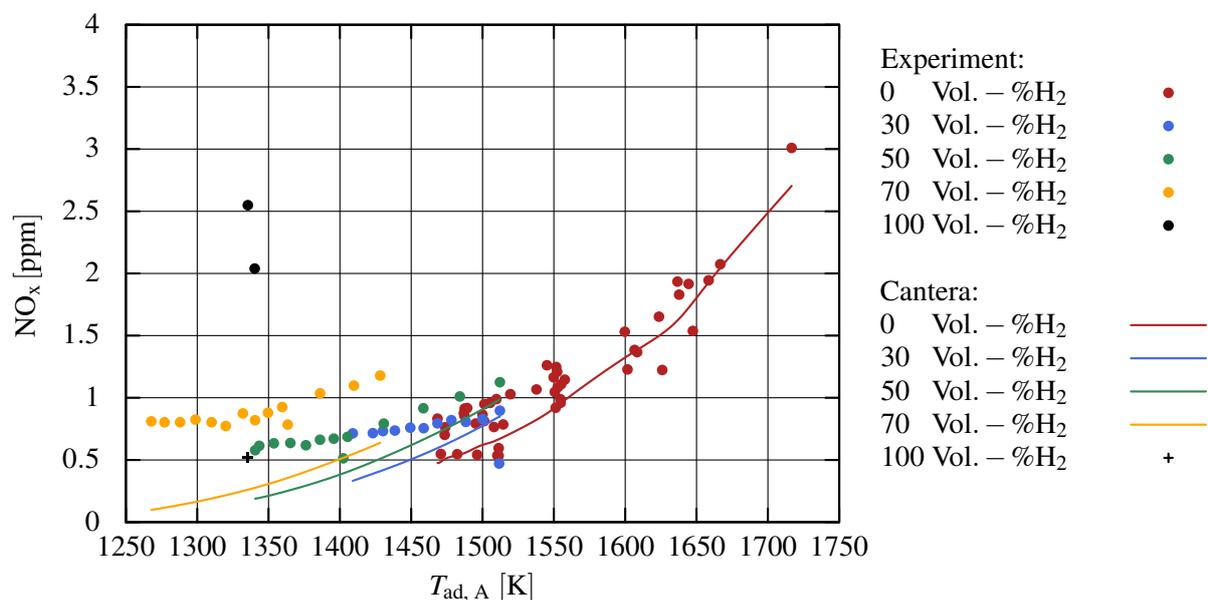


Abbildung 5.6: Validierung der NO_x -Emissionen in Abhängigkeit von $T_{\text{ad,A}}$ ($T_V = 773 \text{ K}$, $\gamma = 0 \dots 1$) aus Abbildung 5.5.

5.4 Strömungsfeld (CFD) der VZPM-Brennkammer

Für die numerische Simulation wurde ein 3D-Modell der gesamten Brennkammer mit einem strukturierten Gitter mit 2,1 Millionen Hexaederelementen erstellt. Aufgrund der Instationarität im Kern der Strömung führt die Simulation der Brennkammer im Halbschnitt entlang der geometrischen Symmetrieachse zu Instabilitäten in der Rechnung. Die Grundlagen zur numerischen Modellierung der reaktiven Brennkammerströmung sind bereits in Kapitel 3.3 erläutert worden. Tabelle 5.5 zeigt eine Zusammenfassung der für die Simulationen gewählten Modelleinstellungen in der CFD Software ANSYS Fluent 14.5. Die Diskretisierungsschemata sind analog zu Kaya und Karagoz [61] gewählt worden. Alle CFD-Simulationen werden zeitabhängig (URANS) durchgeführt. Zur Berechnung von zeitlichen Mittelwerten erfolgt eine Mittelung der entsprechenden Variablen über alle Zeitschritte.

Die Verbrennungsreaktion wird mit dem für den jeweiligen Brennstoff gewählten Reaktionsmechanismus mit dem EDC-Modell modelliert. Die Modellierungskonstante C_τ für das Zeitmaß im EDC-Modell ist wie bei Aminian et al. [4]

für die Erdgasverbrennung zu 1,5 gesetzt. Für Erdgas wird der 1-Schritt Mechanismus nach Westbrook und Dryer [126] verwendet, der für den Brennstoff nur die einzige Spezies Methan enthält. Der Fehler, der dadurch bei der Berechnung der Zündverzugszeiten gemacht wird, hat nur geringen Einfluss auf die Lösung, da die Reaktion bei Erdgasverbrennung im Vergleich zu derjenigen bei Wasserstoffverbrennung sehr träge ist. Bei Parente et al. [86] zeigt sich, dass mit zunehmendem Wasserstoffgehalt ein detaillierterer Mechanismus nötig wird, der die Selbstzündvorgänge hinreichend abbilden kann. Deshalb wird die Wasserstoffverbrennung mit dem Mechanismus nach Ó Conaire et al. [85] abgebildet. Der Mechanismus beinhaltet 10 Spezies und 19 Reaktionsgleichungen.

Tabelle 5.5: Zusammenfassung der verwendeten Modelle und Diskretisierungsschemata.

Turbulenzmodell	RSM
Verbrennungsmodell	EDC
Pressure Velocity Coupling	SIMPLE
Pressure	PRESTO!
Momentum	Second Order
Specific Dissipation Rate	Second Order
Reynolds Stresses	First Order

Abbildung 5.7 zeigt einen Vergleich von mit verschiedenen Mechanismen berechneten Zündverzugszeiten für Wasserstoff. Dafür wurden in Cantera die Zündverzugszeiten für $\lambda = 1$ in Abhängigkeit von der Gemischtemperatur berechnet. Zusätzlich sind experimentelle Daten eingetragen. Aus dem Vergleich wird deutlich, dass der Mechanismus nach Ó Conaire et al. [85] die Zündverzugszeiten aus dem Experiment insbesondere im Bereich geringerer Gemischtemperaturen, gut abbilden kann. Dies deckt sich auch mit den Ergebnissen von Zhukov [138] und Ströhle und Myhrvold [110]. Daher wird in der 3D-CFD-Simulation der VZPM-Brennkammer mit Wasserstoff dieser detaillierte Mechanismus in Kombination mit dem EDC-Modell verwendet.

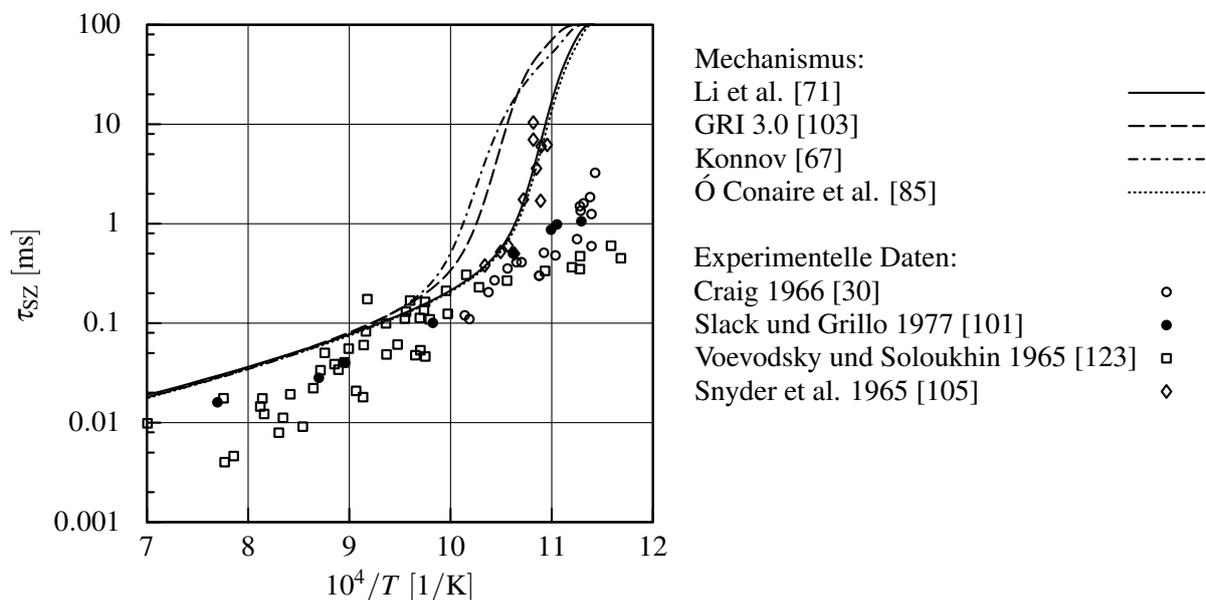


Abbildung 5.7: Vergleich der berechneten Zündverzugszeiten τ_{SZ} mit experimentellen Daten.

5.4.1 Validierung der Simulation

Zur Validierung der numerischen Strömungssimulation werden Geschwindigkeitsverläufe aus PIV-Messungen in der reaktiven Strömung an der VZPM-Brennkammer verwendet [20,60]. Abbildung 5.8 erläutert Position und Bezeichnung der Schnittebenen in Simulation und Experiment. Für die Ebenen A.1-A.3 liegt der Schnitt mittig zwischen den Injektoren. Die Ebenen A.1_{inj}-A.3_{inj} schneiden die Brennkammer in der Injektorebene. Die Geometrie der Wirbelvormischinjektoren wird nicht mit berücksichtigt, am Einlass wird ein perfekt vorgemischtes Brennstoff-Luft Gemisch vorgegeben. Außerdem ist in dieser Grafik der Fensterausschnitt eingezeichnet, innerhalb dessen optische Untersuchungen durchgeführt werden können. Auf den Linien, die in der Draufsicht dargestellt sind, wird innerhalb einer Schnittebene die Geschwindigkeit entlang des Radius ausgewertet, für das Experiment von $0 \rightarrow R_{\text{Fenster}}$ und für die Simulation von $0 \rightarrow R_{\text{BK}}$. Das Geschwindigkeitsprofil wird über die acht gezeigten Linien in Umfangsrichtung gemittelt. Aus der Literatur ist (wie bereits in Kapitel 3.3.1 erwähnt) bekannt, dass die Tangentialgeschwindigkeit bei hohen Drallzahlen den Betrag der Geschwindigkeit dominiert [102, 127]. Die experimentellen Untersuchungen mit PIV zeigen das Geschwindigkeitsfeld für die Geschwindigkeit

$\sqrt{\bar{u}_\varphi^2 + \bar{u}_{\text{rad}}^2}$. Um den Vergleich der Messdaten mit der Simulation zu vereinfachen, wird daher im weiteren Verlauf angenommen, dass gilt $\bar{u}_\varphi \approx \sqrt{\bar{u}_\varphi^2 + \bar{u}_{\text{rad}}^2}$.

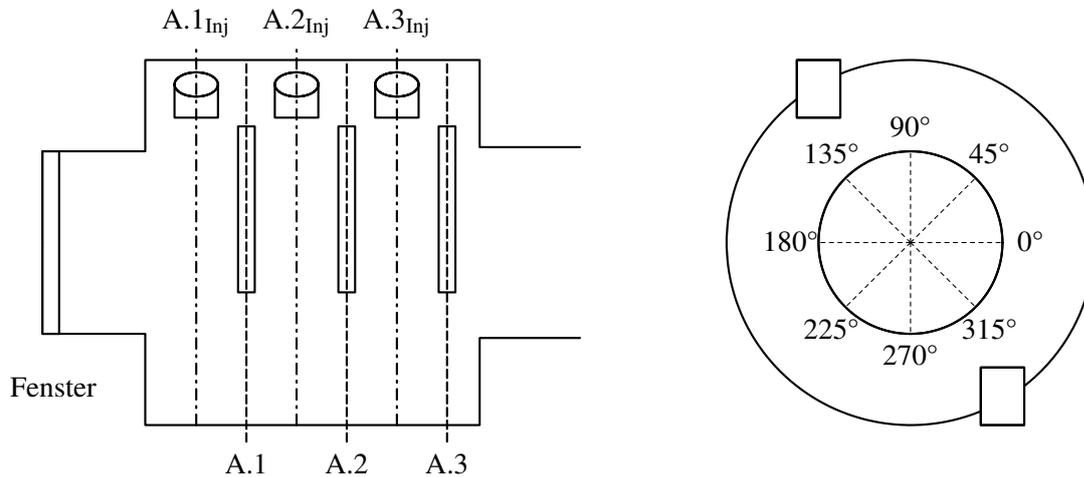


Abbildung 5.8: Positionen der Schnittebenen in Experiment und Simulation und der Fensterausschnitt der PIV-Messungen.

Im ersten Schritt wird der Fall mit dem in Tabelle 5.6 gezeigten Betriebspunkt gerechnet und mit den zugehörigen PIV-Daten verglichen. Dieser Betriebspunkt wurde gewählt, da er auch im Betriebsbereich der Messungen in dieser Arbeit liegt. Allerdings wird bei diesem Betriebspunkt der verfügbare, optisch zugängliche Bereich nicht komplett genutzt. Abbildung 5.9 zeigt im linken Teil den Vergleich der Tangentialgeschwindigkeit aus Simulation und Experiment aufgetragen über den entdimensionierten Radius r/R_{Ref} . Die Übereinstimmung der Profile der mittleren Tangentialgeschwindigkeiten \bar{u}_φ von Simulation und Experiment ist gut, der qualitative Verlauf im Kern der Strömung kann abgebildet werden. Auch zeigt das Bild, dass sich zwischen den Ebenen A.1 bis A.3 der Geschwindigkeitsverlauf nicht wesentlich ändert. Da der gewählte experimentelle Validierungspunkt nur für den Kern der Strömung Daten zur Verfügung stellt, wird mit einem analytischen Modell im zweiten Schritt der Randbereich untersucht. Aus weiteren Experimenten mit anderen Betriebspunkten von Kappe [60], die den Radius des optischen Zugangs voll ausnutzen, werden für den analytischen Ansatz aus Gleichung (3.14) mit der Methode der kleinsten Quadrate die Konstanten a_1 und a_2 für die Ebene A.2 bestimmt. Für den Exponenten wird $a_3 = 2,5$ gewählt. Die Konstanten von Busenthür [23] sind lediglich bis zu

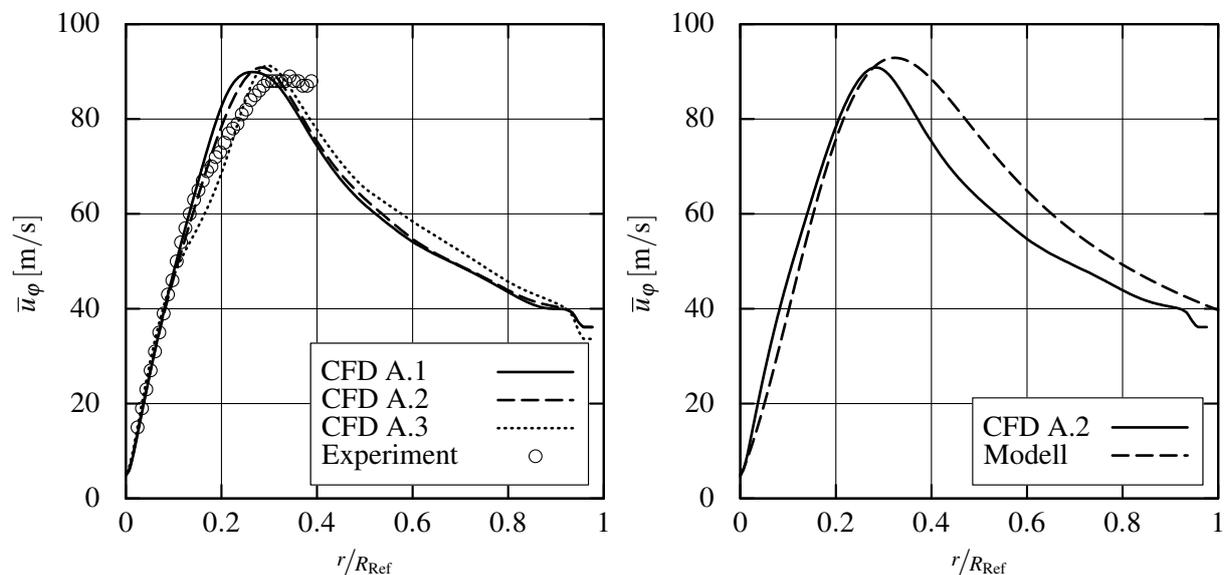


Abbildung 5.9: Validierung der Simulation mit PIV-Daten (links) und dem analytischen Modell (rechts).
Betriebspunkt: A CH4 Val (siehe Tabelle 5.6).

einer Drallzahl von $S = 2$ validiert und wurden für eine nicht reaktive Strömung bestimmt. Zusätzlich wird der Ansatz für die Skalierung der Drallzahl für eine reaktive Strömung nach Syred und Beer [111] herangezogen, um den Einfluss der Verbrennungsreaktion auf die Drallzahl zu berücksichtigen:

$$a_{1/2} = a_{iso,1/2} \cdot \frac{T_{ein}}{T_{aus}}. \quad (5.3)$$

Die Konstanten a_1 und a_2 werden zwar nicht wie bei Busenthür mit der Drallzahl korreliert, aber die Skalierung der Konstanten mit Gleichung (5.3) nach Beer führt zu einer deutlichen Verbesserung der Residuen des Fitvorgangs. Mit dem entdimensionierten Radius $r^* = r/R_{\text{Ref}}$ ergibt sich das analytische Modell zu

$$\frac{u_\varphi(r^*)}{\bar{u}_{x,0}} = \frac{a_1}{r^*} \left(1 - \exp\left(\frac{-r^{*2,5}}{a_2}\right) \right) \quad (5.4)$$

mit $a_1 = 14,32 \cdot \frac{T_v}{T_{\text{BK}}}$ und $a_2 = 0,0897 \cdot \frac{T_v}{T_{\text{BK}}}$.

Im rechten Teil von Abbildung 5.9 ist der Vergleich der aus dem analytischen Modell berechneten mittleren Tangentialgeschwindigkeit mit der aus der CFD-Simulation über den entdimensionierten Brennkammerradius dargestellt. Der

Betrag des Maximums des Profils wird gut getroffen, auch das qualitative Verhalten des Abklingens in Richtung Wand kann abgebildet werden, wenn auch dabei die Geschwindigkeit tendenziell überschätzt wird. Die Position des Maximums und der Verlauf der Geschwindigkeit im Bereich der Kernströmung zeigen ebenfalls eine gute Übereinstimmung. Durch Integration des analytischen Verlaufs analog zur Definition der mittleren Drallzahl nach Tepliczky [114] kann so auch die Drallzahl der reagierenden Strömung bestimmt werden:

$$S_m = 5,4. \quad (5.5)$$

Sowohl die reagierende als auch die nichtreagierende Strömung innerhalb der Brennkammer sind, aufgrund der vorliegenden hohen Drallzahlen, nach Syred und Beer [111] den Zyklonströmungen zuzuordnen.

5.4.2 Reaktives Strömungsfeld für Erdgas und Wasserstoff

Abbildung 5.10 zeigt die Konturplots des Verdünnungsfalls (Bezeichnung: A CH₄ Val) für den zeitgemittelten Betrag der Geschwindigkeit $|\bar{u}|$, der Geschwindigkeitskomponenten \bar{u}_φ und \bar{u}_x , der Temperatur \bar{T} und der Wärmefreisetzungsrates \bar{Q} für CH₄. Dargestellt sind jeweils der Längsschnitt und der Schnitt durch die Injektorebene A.2_{inj}. Die in Kapitel 3.3.1 beschriebenen Phänomene stark verdrallter Strömungen zeigen sich auch in den Darstellungen der Geschwindigkeiten. Der Tangentialanteil dominiert den Betrag der Geschwindigkeiten innerhalb der Brennkammer. Aufgrund der hohen Drallzahl stellt sich eine Rückströmung in axialer Richtung ein. Die Instabilität im Zentrum weist auf den präzessierenden Wirbelkern hin, der sich um den geometrischen Mittelpunkt der Brennkammer bewegt. Für die Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes ist es wichtig, dass qualitativ die Temperatur und die Wärmefreisetzungsrates die verteilte Reaktionszone abbilden. Die Wärmefreisetzungsrates zeigt die verteilte Reaktionszone vorwiegend im Randbereich der Strömung, im Kernbereich kommt die Reaktion zum Erliegen. Auch sind die Temperaturgradienten in der Brennkammer sehr gering. Der 1-Schritt-Mechanismus reicht somit aus um die wesentlichen Merkmale der reagierenden Strömung abzubilden.

Tabelle 5.6: Betriebspunkt A CH4 Val nach Kappes [60] zur Validierung des CFD-Setups.

	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ [g/s]	Luftzahl [-]	T_{ad} [K]	T_v [K]	γ [-]
A CH4 val	74,00	3,15	1508	790	0

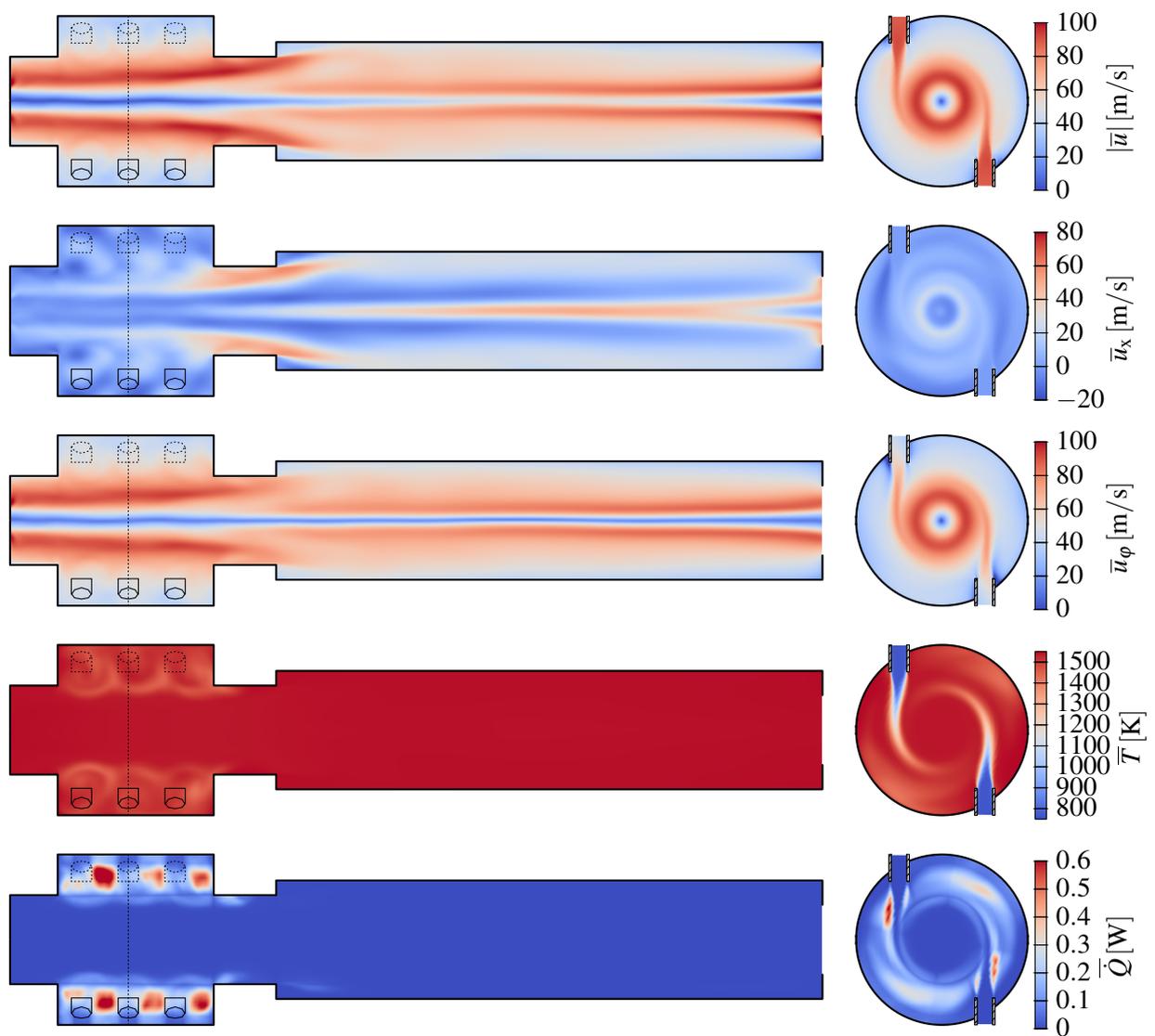


Abbildung 5.10: A CH4 Val: Zeitlich gemittelte Konturplots der Schnitte längs der Brennkammer und in der Ebene A.2_{inj}.

Tabelle 5.7: Betriebspunkt A H2 1250K für Wasserstoffbetrieb der VZPM-Brennkammer.

	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ [g/s]	Luftzahl	T_{ad} [K]	T_v [K]	γ [-]	S_m [-]
A H2 1250K	70,27	7,4	1250	873	1	6,9

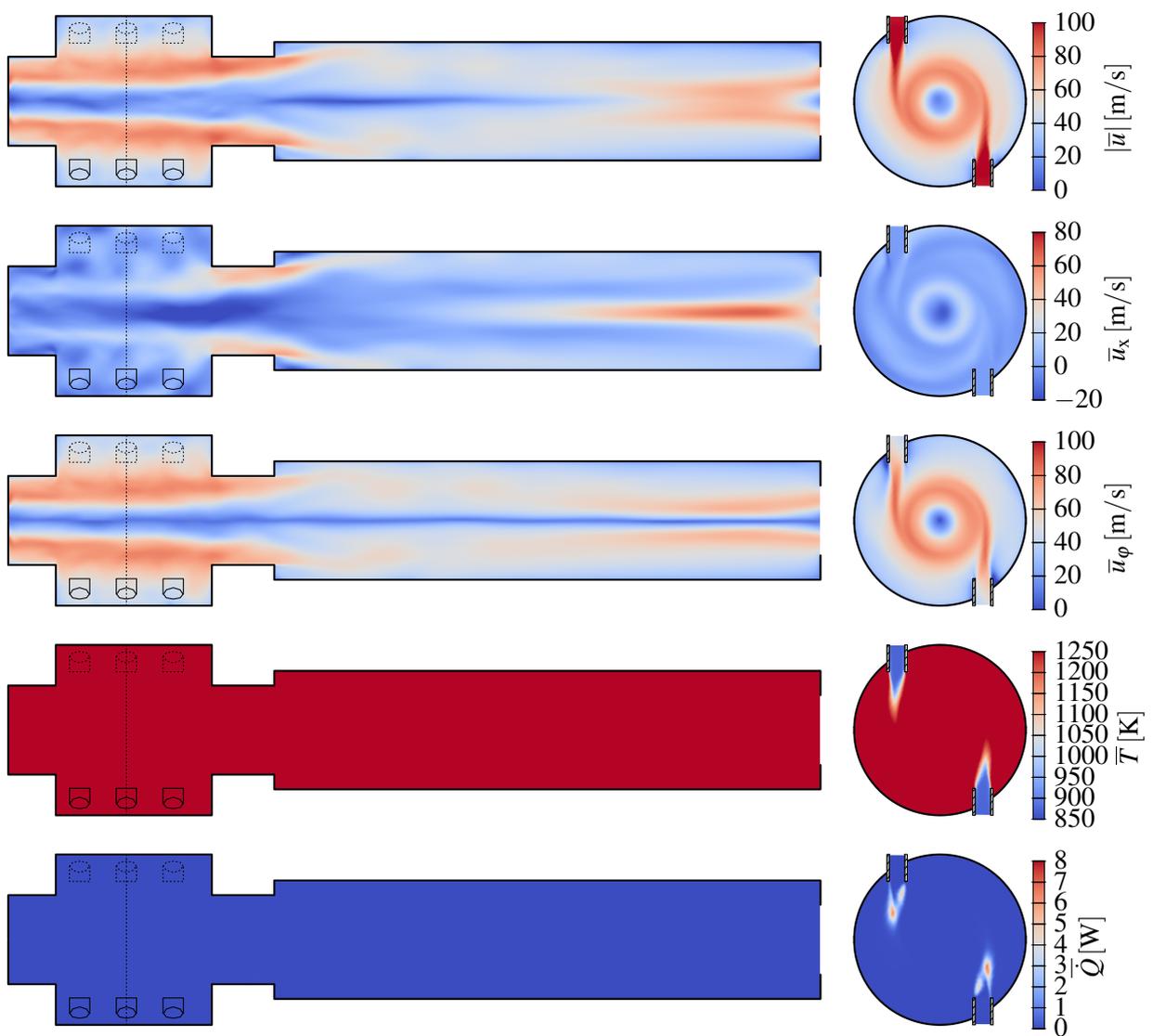


Abbildung 5.11: A H2 1250K: Konturplots der Schnitte längs der Brennkammer und in der Ebene A_{2inj} .

Die Simulation der Wasserstoffverbrennung ist mit einem 1-Schritt-Mechanismus aufgrund der hohen Vorwärmtemperaturen nur sehr ungenau möglich. Das perfekt vorgemischte Frischgas reagiert sofort am Beginn des Injektors. Dieses Verhalten wird in der Simulation dadurch verursacht, dass der Einschrittmechanismus das Selbstzündverhalten nur ungenügend abbilden kann, was zu einer falschen Flammenposition führt. Durch die Verwendung des Mechanismus nach Ó Conaire et al. [85] wird die Reaktionszone in die Brennkammer verschoben, was dem tatsächlich im Experiment beobachteten Verhalten besser entspricht. Die Konturbilder der Temperatur und der Wärmefreisetzung sind in Abbildung 5.11 dargestellt (Bezeichnung: A H2 1250K). Sie zeigen, dass sich die Reaktionszone in Richtung Brennkammer verschiebt und nicht mehr direkt am Einlass liegt, obwohl sich der gewählte Betriebspunkt oberhalb der Selbstzündtemperatur von Wasserstoff befindet (Tabelle 5.7). Die Reaktionszone nimmt im Vergleich zur Erdgasverbrennung deutlich weniger Volumen im Brennraum ein. Der qualitative Verlauf der Tangentialgeschwindigkeit ist ähnlich dem Geschwindigkeitsprofil aus dem analytischen Ansatz aus Gleichung (5.4). Abbildung 5.12 zeigt, dass der Betrag der absoluten Geschwindigkeit mit dem Modell um maximal 15 % überschätzt wird. Die aus dem Modell berechnete Drallzahl ergibt sich zu 6,9 (Tabelle

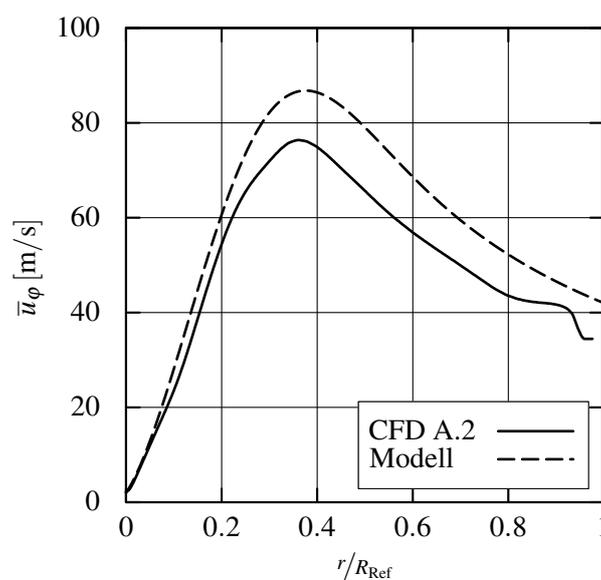


Abbildung 5.12: Tangentiales Geschwindigkeitsprofil des Betriebspunktes mit Wasserstoff A H2 1250K (vgl. Tabelle 5.7) im Vergleich mit dem Modell.

5.7). Aufgrund der höheren Drallzahl im Vergleich zu Erdgas zeigt sich bei diesem Fall die Instabilität im Kern der Strömung ausgeprägter. Außerdem bildet sich ein deutlicheres Rückstromgebiet im Bereich des Flächensprungs am Brennkammerende.

Zusammengefasst zeigt sich, dass für beide Fälle (Erdgas und Wasserstoff) der gewählte Modellierungsansatz gut zu den verfügbaren Daten passt. Für Wasserstoff wurde der Mechanismus nach Ó Conaire et al. [85] in Kombination mit dem EDC-Modell in Strömungen mit hohem Drall implementiert. Auch für Erdgas gelingt es mit dem gewählten Setup das Verbrennungsregime der verdünnten Verbrennung abzubilden. Für die Weiterentwicklung der VZPM-Brennkammer kann dieser Ansatz für die Untersuchung des Strömungsfeldes genutzt werden.

6 Gestuftes Brennkammerkonzept mit verdünnter Verbrennung

Mit den Erkenntnissen aus der Prozessmodellierung und den validierten Methoden zur numerischen und experimentellen Untersuchung verdünnter Verbrennung in starken Drallströmungen kann nun ein neues Brennkammerkonzept für die T100 untersucht werden. In diesem Kapitel wird ein gestuftes Verbrennungskonzept für Erdgas und Wasserstoff vorgestellt. Es wird experimentell unter Umgebungsbedingungen hinsichtlich seines Betriebsbereiches untersucht. Der Betriebsbereich wird einerseits durch die NO_x -Emissionen und andererseits durch die magere Verlöschgrenze begrenzt. In Abschnitt 6.4 werden die Ergebnisse der Untersuchungen im Hinblick auf die Bedingungen in der Mikrogasturbine bewertet. Dabei dienen die Betriebspunkte folgender drei Konfigurationen als Referenz: die Betriebsbedingungen der T100, wenn sie nicht mit einem LOHC-Speicherzyklus gekoppelt ist (T100), die Betriebsbedingungen, wenn die T100 in einem Speicherzyklus mit NEC verwendet wird (T100+NEC) und wenn sie an einen Zyklus mit DBT gekoppelt ist (T100+DBT).

6.1 Aufbau der Brennkammer

Im ursprünglichen Brennkammerkonzept der T100 wird die restliche Frischluft nach dem Brennraum stromab zugemischt, so dass die Mischungstemperatur dann T_4 ergibt. Das bedeutet, dass nicht die ganze Frischluft der MGT am Verbrennungsprozess teilnimmt. Die hohe globale Luftzahl erlaubt für reinen Wasserstoff noch eine Absenkung der adiabaten Flammentemperatur T_{ad} bis hin zur Turbineneintrittstemperatur T_4 . Daraus folgt auch, dass ein Großteil der Frischluft am Verbrennungsprozess teilnehmen muss. Durch die Reduzierung der adiabaten Flammentemperatur kann die Entstehung von Stickoxiden verhindert

werden. Für Erdgas kann die adiabate Flammentemperatur nicht beliebig weit abgesenkt werden, da durch die geringere Reaktivität von Erdgas die magere Verlöschgrenze bei fetteren Gemischen und somit bei höheren T_{ad} im Vergleich zu Wasserstoff liegt. Soll das Brennkammerkonzept mit beiden Brennstoffen (Erdgas und Wasserstoff) funktionieren, muss die magere Verlöschgrenze von Erdgas berücksichtigt werden.

Zusätzlich geht mit einer Erhöhung des Frischgasmassenstroms in der VZPM-Brennkammer einher, dass der Druckverlust in den Injektoren und über die Brennkammer steigt. Die Verwendung der gesamten Frischluft, die die Mikrogasturbine zur Verfügung stellt, ist in der VZPM-Brennkammer daher nicht möglich.

Für die Umsetzung der oben genannten Anforderungen werden zwei VZPM-Brennkammern in einer gestuften Konfiguration aufgebaut. Abbildung 6.1 zeigt eine schematische Darstellung des Schnitts durch die Brennkammer mit den jeweiligen Bezeichnungen. Nach dem Flächensprung A der VZPM-Brennkammer (Stufe A) wird eine zweite VZPM-Brennkammer (Stufe B) eingebaut. Aus fertigungstechnischen Gründen muss nach dem Flächensprung noch ein Blindring eingefügt werden, der den gleichen Innendurchmesser wie die Keramikbrennkammer hat. Das gestufte Konzept verfügt so also über insgesamt 12 Injektoren, die in den beiden Stufen A und B das Frischgas zuführen. Bauer et al. [12, 13] zeigen Untersuchungen zur Sicherheit und Mischqualität des verwendeten Wirbelvormischinjektors. Der WVMi zeigt dabei ein in diesem Betriebsbereich ausreichendes sicheres Verhalten und eine gute Mischungsqualität.

Die Frischluft soll gleichmäßig auf alle Injektoren verteilt werden. Ziel ist es, dass 100 % der Frischluft, die die MGT zur Verfügung stellt, am Verbrennungsprozess teilnimmt, da dies vorteilhaft für die Sicherheit im Wasserstoffbetrieb ist. Die Vorwärmtemperaturen der berechneten Betriebspunkte befinden sich im Bereich der Selbstzündtemperaturen von Wasserstoff. Dadurch ist das Risiko einer unerwünschten Zündung in den Injektoren erhöht. Dies kann durch zwei Maßnahmen verringert werden. Einerseits verlangsamt die Absenkung der Verbrennungstemperatur die Kinetik und andererseits verhindert einer hoher Massenstrom im Injektor die Stabilisierung einer Flamme. Für den Erdgasbetrieb, soll wie bei der ursprünglichen Konfiguration, nur die Stufe A befeuert werden,

in der Stufe B wird die übrige Frischluft zugemischt. Im Betrieb mit Wasserstoff werden sowohl Stufe A und als auch Stufe B befeuert. Dadurch kann T_{ad} am Ende der zweiten Stufen gleich gehalten werden. Für jede Stufe einzeln jedoch kann lokal den Verbrennungseigenschaften der beiden Brennstoffe Rechnung getragen werden.

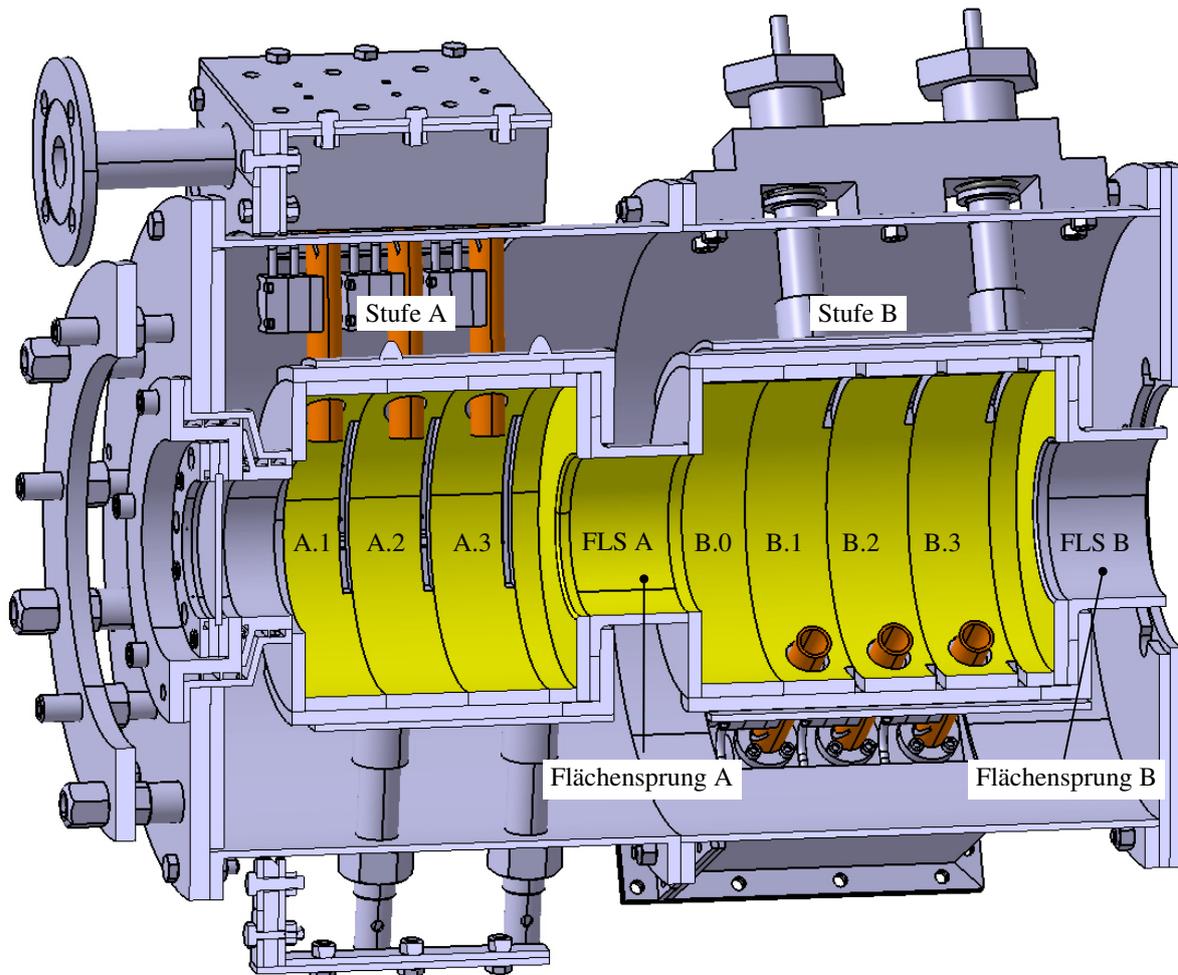


Abbildung 6.1: Darstellung des gestuften Brennkammer im Schnitt mit den zugehörigen Abkürzungen und Bezeichnungen (nach [83]).

6.2 Untersuchung der Stufung mit numerischer Strömungssimulation

Aufgrund der eingeschränkten optischen Zugänglichkeit der Brennkammer wird das gestufte Brennkammerkonzept vorab mit numerischer Strömungssimulation untersucht. Ziel ist es dabei, die Auswirkung der Stufung auf das Strömungsfeld einzuschätzen. Diese wird anhand der Geschwindigkeitsprofile und der Mischungsgüte bewertet. Des Weiteren wird auch noch der Einfluss der Eintrittsgeschwindigkeit des Frischgases in die Brennkammer untersucht.

Für die numerische Berechnung werden die Einstellungen verwendet, die in Kapitel 5.4 validiert wurden. Als Betriebspunkt ist der Nennlastpunkt der MGT T100 mit dem gesamten zur Verfügung stehenden Frischluftmassenstrom exemplarisch in Tabelle 6.1 gezeigt. Die Brennstofftemperatur $T_{Br} = 363$ K entspricht der gemessenen Brennstofftemperatur am Einlass in den WVMi aus dem Experiment aus Kapitel 5. Untersucht wurde die gestufte Brennkammer für die drei Betriebspunkte T100, T100+NEC und T100+DBT, jeweils für Methan und Wasserstoff. Sie wurden in Kapitel 4 bestimmt und unterscheiden sich in der Vorwärmtemperatur und der Luftzahl in der Brennkammer. Die Bezeichnung der Betriebspunkte ergibt sich aus der Stufung (A: VZPM-Brennkammer, A B: gestufte Brennkammer), dem Brennstoff (H₂: Wasserstoff, CH₄: Methan) und dem Betriebspunkt (T100, T100+NEC, T100+DBT).

Es sei vorweg genommen, dass sich die betrachteten Fälle hinsichtlich des Mischverhaltens und des qualitativen Verlaufs der Tangentialgeschwindigkeiten ähnlich verhalten. Die absoluten Werte der Tangentialgeschwindigkeiten unterscheiden sich aufgrund der unterschiedlichen Vorwärmtemperaturen T_v und des dadurch geänderten Tangentialimpulses. Da aber das grundsätzliche Verhalten des gestuften Brennkammerkonzeptes in diesem Abschnitt gezeigt werden soll, wird dies exemplarisch am Fall T100 erklärt. Die Ergebnisse der beiden anderen Fälle T100+DBT und T100+NEC sind als Anhang A angefügt.

Abbildung 6.2 zeigt Profile der gemittelten Tangentialgeschwindigkeiten der gestuften Brennkammer, jeweils für Wasserstoff und Methan und in den Stufen A und B. Zum Vergleich ist noch der Referenzfall der VZPM-Brennkammer im

6.2 Untersuchung der Stufung mit numerischer Strömungssimulation

Tabelle 6.1: Randbedingung der Simulation T100.

	Massentrom Stufe A [g/s]	Massenstrom Stufe B [g/s]	Luftzahl A [-]	Luftzahl B [-]	$T_{ad,A}$ [K]	$T_{ad,B}$ [K]	T_v [K]
A B CH4 T100							
Methan	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 86,8	\dot{m}_L 85,3	3,49	-	1534	-	894
A B H2 T100							
Wasserstoff	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 85,6	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 85,6	8,4	8,4	1227	1227	894

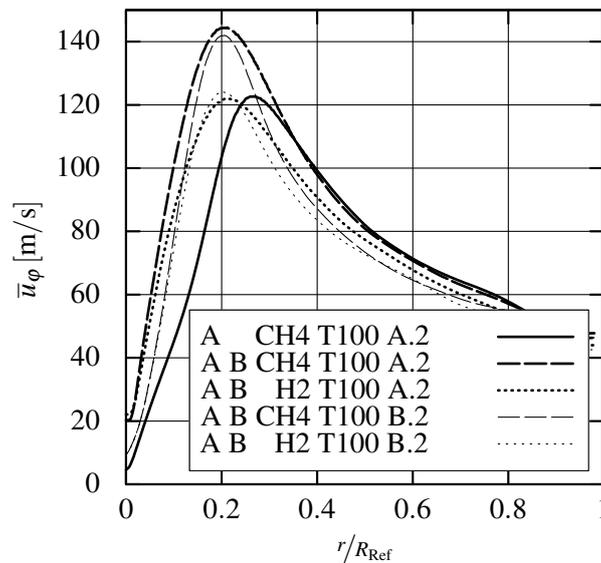


Abbildung 6.2: Vergleich des Verlaufs der Tangentialgeschwindigkeiten der VZPM-Brennkammer und des gestuften Konzepts für Erdgas und Wasserstoff.

Betriebspunkt der T100 bei Nennlast mit Methan eingezeichnet (nicht gestuft, A CH4 T100). Vergleicht man die Fälle A CH4 T100 und A B CH4 T100 in den Ebenen A.2, zeigt sich ein Einfluss auf den maximalen Betrag der Tangentialgeschwindigkeit durch die Stufung. Dies lässt sich auf den insgesamt höheren Druckabfall innerhalb der gestuften Brennkammer zurückführen, der dadurch zustande kommt, dass die gestufte Brennkammer in axialer Richtung wesentlich länger ist und eine zusätzliche Querschnittsveränderung aufweist. Die Position

des Maximums der Tangentialgeschwindigkeit verschiebt sich hin zu kleineren Radien. In der Ebene B.2 ist die Tangentialgeschwindigkeit nach wie vor ähnlich zu Ebene A.2, obwohl hier keine Verbrennung mehr stattfindet. Insbesondere im Kern der Strömung ist die Temperatur höher, da die vollständige homogene Vermischung erst ab Flächensprung B erreicht ist. Die absoluten Beträge der Tangentialgeschwindigkeit für Wasserstoff sind geringer. Das liegt an der lokal für Stufe A betrachteten geringeren adiabaten Flammentemperatur. Da in beiden Stufen der Brennstoff gleich aufgeteilt ist, bleibt aufgrund gleichbleibender adiabater Flammentemperaturen in Stufe A und B die Geschwindigkeit gleich.

Die Abbildungen 6.3 und 6.4 zeigen einen Längsschnitt durch die Brennkammer. Dargestellt sind die Konturplots der Axialgeschwindigkeit, der Tangentialgeschwindigkeit und der passive Skalar f_A . Am Übergang zum Abgaskanal (FLS B - AGK) bildet sich in beiden Fällen eine Rückströmung im Kern aus, die aber nicht bis in die Stufe A zurückreicht (siehe Abbildung 6.3, 6.4). Auch zeigt sich, wie im Strömungsfeld der VZPM-Brennkammer, die Instationarität des Wirbel-

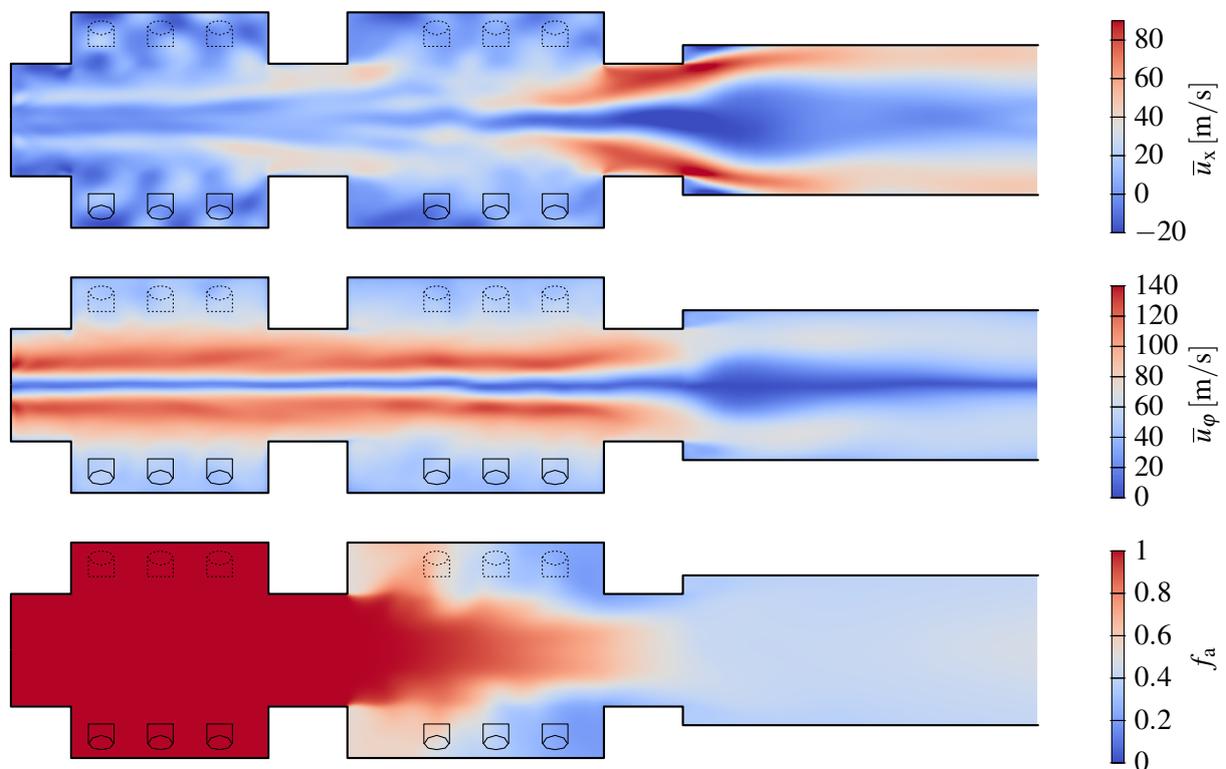


Abbildung 6.3: A B H2 T100: Konturplots der gestuften Brennkammer im Betrieb mit Wasserstoff

kerns aufgrund des hohen Dralls. Zusammengefasst verhalten sich die beiden betrachteten Fälle bezüglich der Geschwindigkeiten ähnlich zur nicht gestuften VZPM-Brennkammer.

Insbesondere für den Betrieb mit Erdgas ist es wichtig, dass aus Stufe B keine kalte Frischluft in Stufe A rezirkuliert wird. Dies würde eine zusätzliche Verdünnung mit kalter Frischluft bedeuten, was zu einem früheren Verlöschen der Brennkammer führen würde. Um das Mischverhalten zwischen den beiden Stufen zu untersuchen, wird ein passiver Skalar f_A eingeführt, der das Gemisch aus Stufe A markiert [6, 47]. Als Einlassrandbedingung besitzt er am Einlass in Stufe A den Wert 1 und in Stufe B den Wert 0. Mit diesem Ansatz kann der Grad der Vermischung zwischen Gas aus Stufe A und Stufe B beurteilt werden. Der Skalar f_A ist in der gesamten Stufe A $f_A = 1$. Daher kann davon ausgegangen werden, dass kein Frischgas aus Stufe B in die Stufe A rezirkuliert wird (Abbildung 6.4, 6.3). Bei homogener Vermischung von Gas aus Stufe A und Stufe B ist der Wert des Skalars $f_A = 0,5$. Am Übertritt in den Abgaskanal ist somit

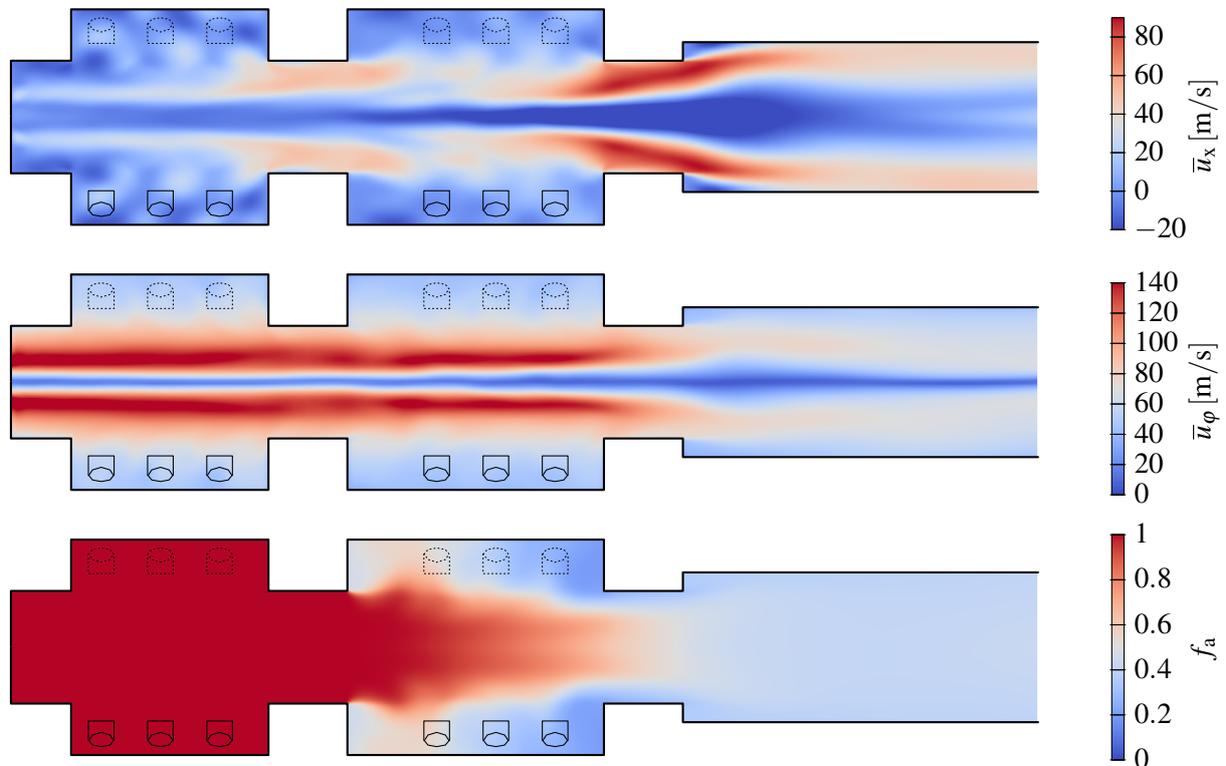


Abbildung 6.4: A B CH₄ T100: Konturplots der gestuften Brennkammer im Betrieb mit Erdgas.

eine homogene Vermischung zwischen Gas aus Stufe A und Stufe B erreicht (Abbildung 6.4, 6.3).

Abbildung 6.5 zeigt die entdimensionierte Temperatur ϑ und die Wärmefreisetzungsrate in der Ebene $A.2_{inj}$ für ähnliche $T_{ad,A}$, aber unterschiedliche Geschwindigkeiten am Austritt des Injektors. Die Temperatur wird mit

$$\vartheta = \frac{T_{ad} - T}{T_{ad} - T_v} \quad (6.1)$$

entdimensioniert. Die Wärmefreisetzungsrate \dot{Q} ist auf das Maximum des jeweiligen Brennstoffs normiert. Verglichen werden die Referenzfälle der VZPM-Brennkammer aus Kapitel 5 mit den Fällen des gestuften Konzepts. Die Ergebnisse der VZPM-Brennkammer sind dabei mit A gekennzeichnet. Das gestufte Konzept ist mit A B deklariert. Aus Abbildung 6.2 ist ersichtlich, dass im Randbereich der Brennkammer das Geschwindigkeitsprofil unabhängig von der Brennkammerkonfiguration verläuft. Daher wird die Einmischung des Abgases zwischen der VZPM-Brennkammer und der gestuften Konfiguration vergleichbar sein. Die Eindringtiefe des Frischgasmassenstroms in die Brennkammer ist bei Erdgas unabhängig von der Geschwindigkeit am Injektoraustritt. Die Reaktionszone ist in beiden Fällen über den Umfang verteilt. Bei Wasserstoff zeigt sich der Einfluss der Geschwindigkeit deutlicher. Das Frischgas dringt bei höherer

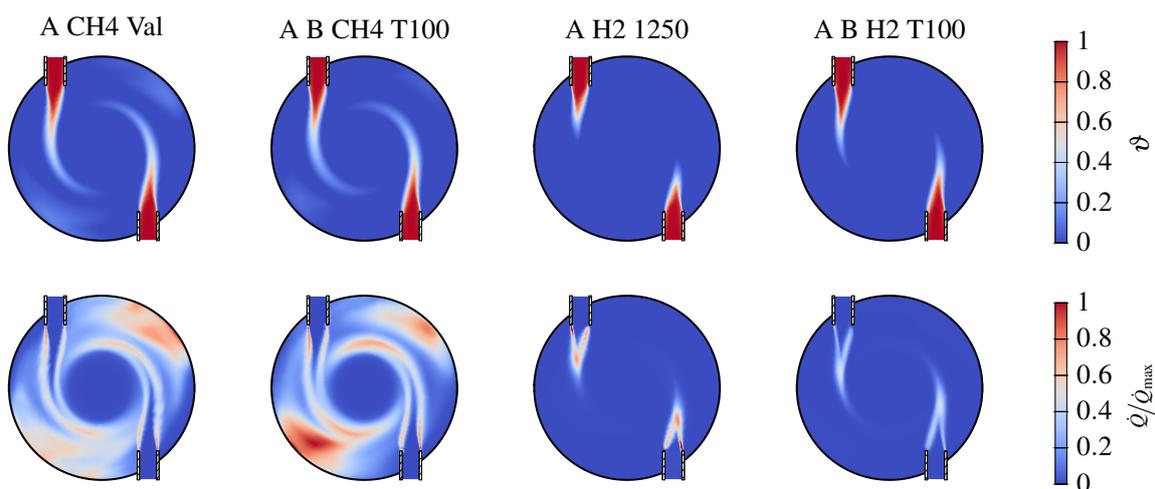


Abbildung 6.5: Vergleich des Einflusses der Geschwindigkeit am Austritt des Injektors für Erdgas und Wasserstoff in der Ebene $A.2_{inj}$.

Geschwindigkeit tiefer in die Brennkammer ein und kann so besser mit Abgas verdünnt werden.

Tabelle 6.2: Der Betriebspunkte zur Beurteilung des Einflusses der Geschwindigkeit am Austritt des Injektors in Abbildung 6.5.

	Massentrom Stufe A [g/s]	Massenstrom Stufe B [g/s]	Luftzahl A [-]	Luftzahl B [-]	$T_{ad,A}$ [K]	$T_{ad,B}$ [K]	T_v [K]
A CH4 val	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 74,0	\dot{m}_L X	3,15	X	1508	X	790
A B CH4 T100	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 86,8	\dot{m}_L 85,3	3,49	-	1534	-	894
A H2 1250K	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 70,3	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ X	7,4	X	1250	X	873
A B H2 T100	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 85,6	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 85,6	8,4	8,4	1227	1227	894

6.3 Experimentelle Untersuchungen

Im Experiment wird die Betriebscharakteristik der gestuften Brennkammer hinsichtlich der Emissionen und des mageren Verlöschens jeweils für Erdgas und Wasserstoff untersucht. Dabei wird die gleiche Vorgehensweise wie für die experimentellen Untersuchungen an der VZPM-Brennkammer angewendet.

Die Peripherie des experimentellen Aufbaus ist identisch mit dem aus Kapitel 5, da die VZPM-Brennkammer lediglich um eine Stufe erweitert wird. Die vorgewärmte Frischluft wird über einen Massenstromteiler auf die zwei Stufen verteilt. Die Verteilung der Massenströme Stufe A zu Stufe B wurde über die Messung von Druckverlusten zur Bestimmung der effektiven Querschnittsflächen ermittelt. Das Verhältnis Stufe A zu Stufe B beträgt 52 vol% zu 48 vol%. Dieses Verhältnis wird für die Experimente bei der Berechnung der adiabaten Flammentemperatur je Stufe berücksichtigt. Für die Brennstoffversorgung sind zwei weitere, jeweils baugleiche, Massenstromregler verbaut, so dass die Stufen A und B unabhängig voneinander mit Brennstoff versorgt werden können.

Für die Darstellung der Ergebnisse in Abhängigkeit von der adiabaten Flammentemperatur wird nicht die globale adiabate Flammentemperatur verwendet, sondern diejenige, die sich aus der Gemischzusammensetzung in Stufe A berechnet. Für Erdgas ist diese somit höher als die globale adiabate Flammentemperatur am Ende der zweiten Stufe. Für Wasserstoff gilt $T_{ad,A} \approx T_{ad}$. Durch die Verwendung von $T_{ad,A}$ können die Ergebnisse der gestuften Brennkammer mit denen der VZPM-Brennkammer verglichen werden.

6.3.1 Messung der Stickoxidemissionen für Erdgas

Alle gemessenen Betriebspunkte für Erdgas ($\gamma = 0$) sind in Abbildung 6.6 dargestellt. Sie zeigt die Stickoxidemissionen aufgetragen über der adiabate Flammentemperatur, die lokal in Stufe A berechnet wird. Eingezeichnet ist ein Fit an die Messpunkte der nicht gestuften Brennkammer aus Kapitel 5, die Messpunkte von Brückner-Kalb [21] und die der gestuften Brennkammer. Auch hier zeigt sich wieder, dass der Einfluss des Massenstroms nicht messbar ist mit diesem Aufbau und die Vorwärmtemperatur hat keinen Einfluss auf das Verhalten der NO_x -Emissionen. Bestimmender Parameter bleibt wie im nicht gestuften Fall T_{ad} . Die NO_x -Werte liegen tendenziell etwas niedriger als die im nicht gestuften Fall. Das sub-ppm Limit liegt bei $\approx 1550\text{ K}$. Unterhalb dieser Grenze werden NO_x -Werte kleiner 1 ppm erreicht.

Zusätzlich sind im Diagramm 6.7 die NO_x -Werte dargestellt, die mit dem Reaktornetzwerkmodell aus Kapitel 5 für die Stufe A berechnet wurden. Die Abweichungen im gestuften Fall sind zwar etwas größer, sie bleiben aber annähernd im Rahmen der Messschwankungen.

6.3.2 Verhalten an der mageren Verlöschgrenze im Erdgasbetrieb

In der Stabilitätskarte (Abbildung 6.8) sind alle gemessenen Messpunkte für Erdgas in Abhängigkeit von $T_{ad,A}$ und der zugehörigen thermischen Leistung aufgetragen. Sowohl T_V als auch der Luftmassenstrom zeigen wenig Einfluss auf

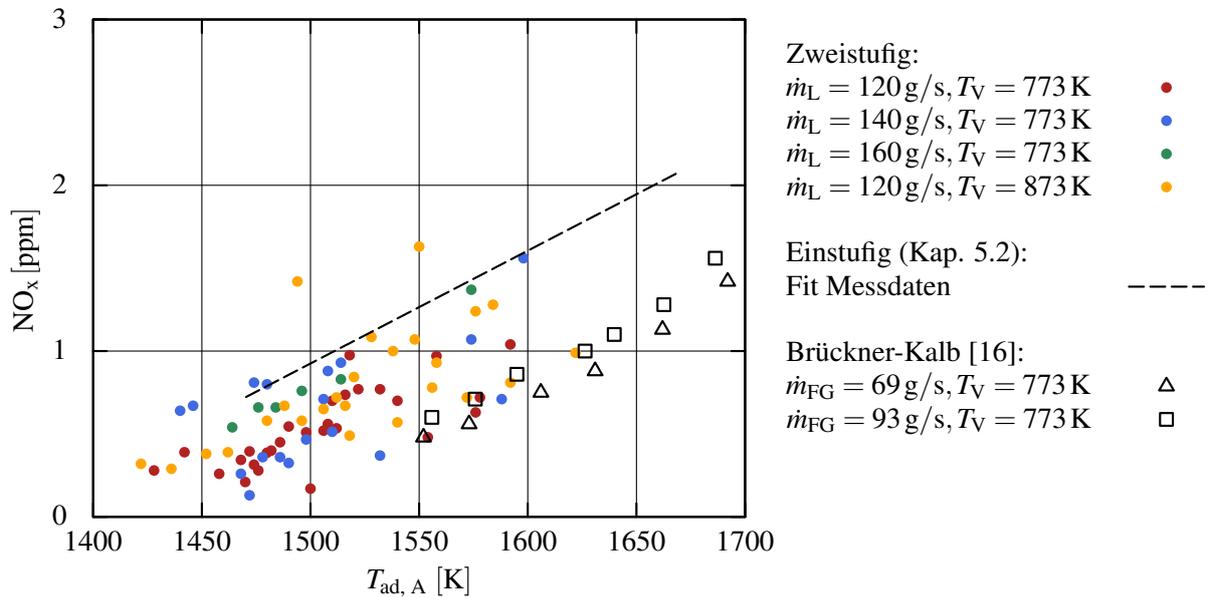


Abbildung 6.6: Vergleich der Messdaten der gestuften Brennkammer mit den Ergebnissen der VZPM-Brennkammer für Erdgas und Vorwärmtemperatur von 773 K und 873 K.

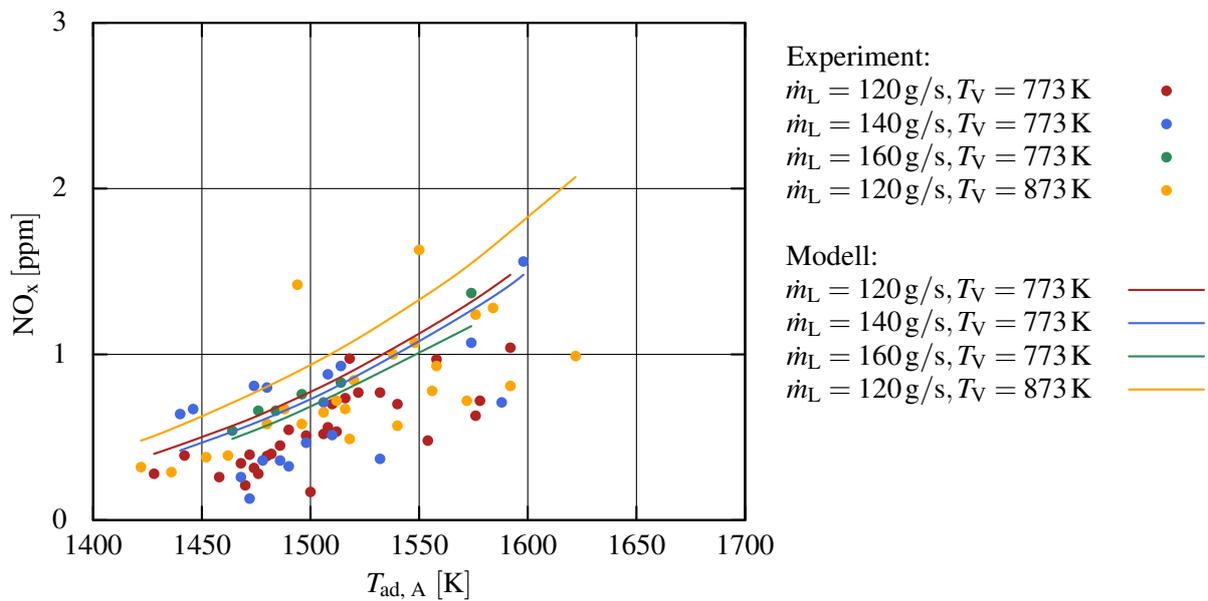


Abbildung 6.7: Vergleich der Stickoxidemissionen mit den Ergebnissen aus dem Reaktornetzwerkmodell für $\gamma = 0$.

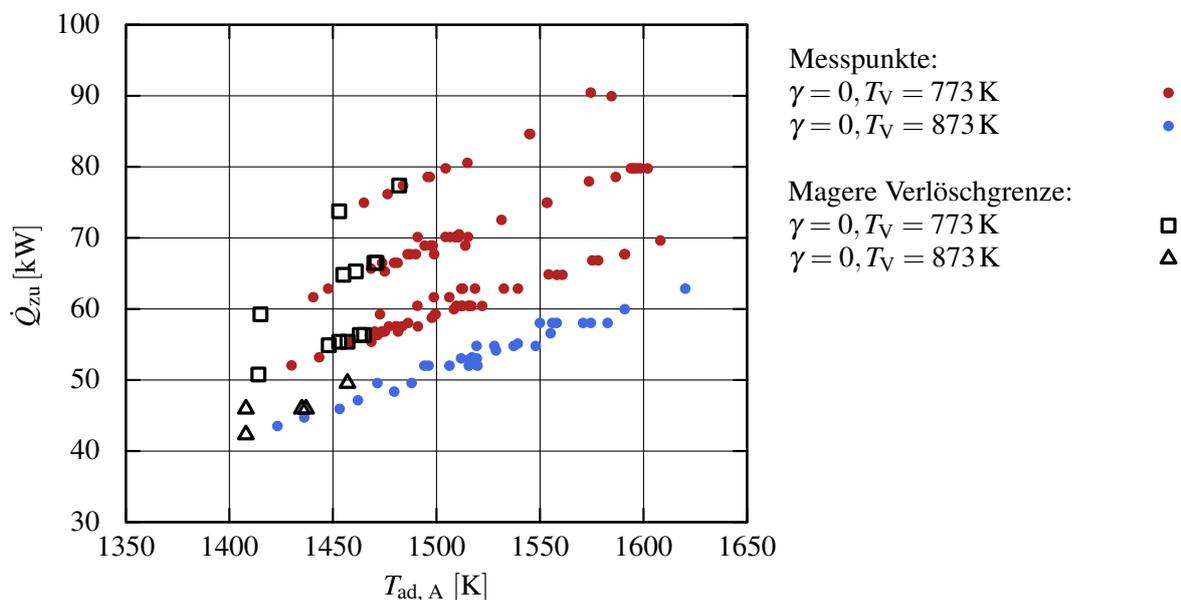


Abbildung 6.8: Stabilitätskarte der gestuften Brennkammer für $\gamma = 0$.

den Beginn des instabilen Bereichs. Dieser beginnt unabhängig von diesen Parametern bei $T_{ad,A}$ kleiner 1500 K.

Die Ergebnisse, die in Abbildung 6.6 und in Abbildung 5.3 dargestellt sind, zeigen, dass sich die magere Verlöschgrenze im Vergleich zur VZPM-Brennkammer nicht zu höheren $T_{ad,A}$ verschoben hat. Der instabile Bereich in der Stabilitätskarte befindet sich in einem Fenster von ≈ 75 K. Im Vergleich des gestuften Brennkammerkonzepts mit der nicht gestuften Konfiguration befinden sich die Messpunkte mit der niedrigsten $T_{ad,A}$ in genau diesem Fenster. Ebenso wie in der numerischen Simulation gibt es kein Anzeichen dafür, dass kaltes Frischgas aus der Stufe A in die Stufe B rezirkuliert wird und die Stabilität verschlechtert.

6.3.3 Messung der Stickoxidemissionen für Wasserstoff

Die Diagramme 6.9 und 6.10 zeigen die Emissionen aufgetragen über $T_{ad,A}$ und über der mittleren Austrittsgeschwindigkeit \bar{u}_{inj} des Frischgases aus dem Injektor. In Abbildung 6.9 sind nur die Luftmassenströme ab 140 g/s dargestellt. Die NO_x -Emissionen kleinerer Massenströme streuen sehr stark und werden der

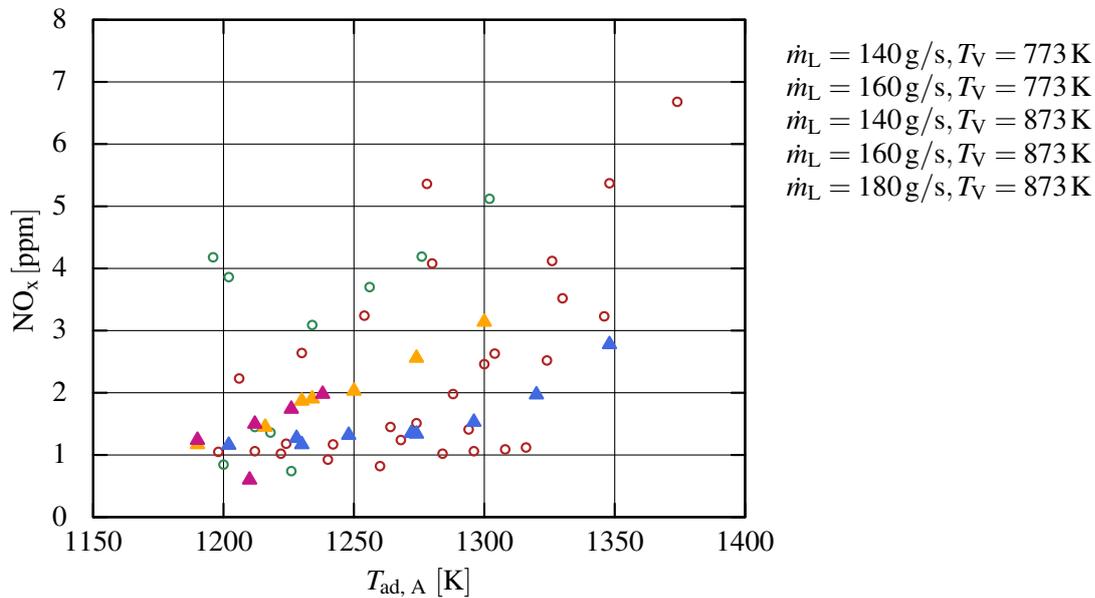


Abbildung 6.9: Einfluss der adiabaten Flammentemperatur auf die Stickoxidemissionen für Wasserstoff.

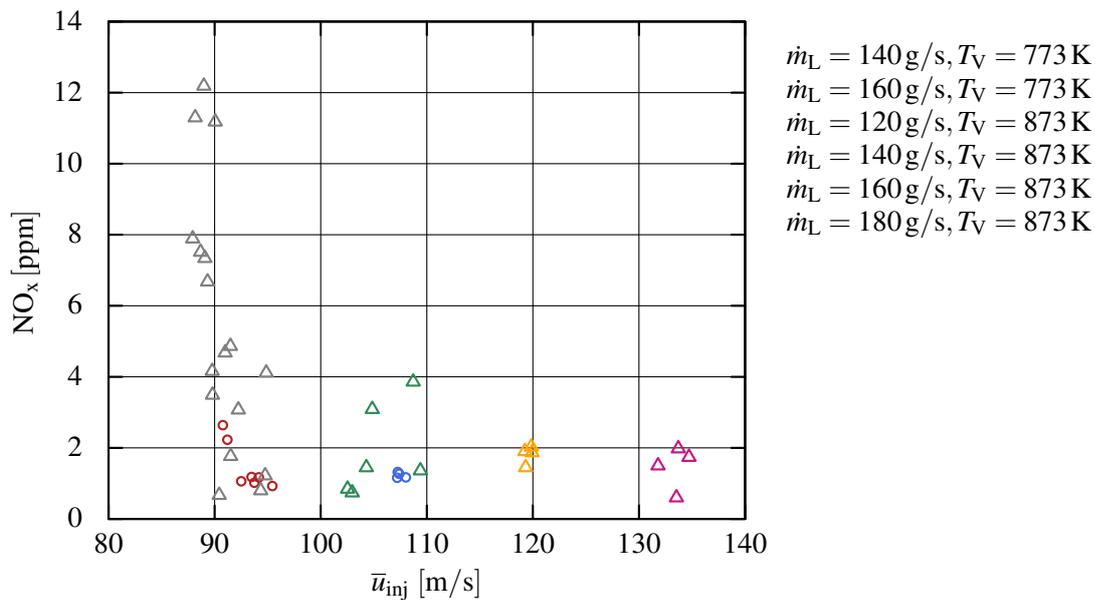


Abbildung 6.10: Einfluss der mittleren Austrittsgeschwindigkeit \bar{u}_{inj} auf die Stickoxidemissionen für Wasserstoff im Betriebsbereich $T_{ad,A} = 1200 \text{ K}$ bis 1250 K .

Übersicht halber in dieser Abbildung nicht dargestellt. Im Betriebsbereich von $T_{ad,A} = 1200$ bis 1350 K werden NO_x -Emissionen von 1 bis 6 ppm erreicht. Unabhängig von der Vorwärmtemperatur zeigen höhere Luftmassenströme ein stabileres und reproduzierbareres Betriebsverhalten. In Abbildung 6.10 werden die

Frischgasmassenströme, umgerechnet in die Austrittsgeschwindigkeit am Injektor, dazu verwendet, den Massenstromeinfluss zu verdeutlichen. In dieser Abbildung sind die Messpunkte ab einem Luftmassenstrom von 120 g/s eingetragen. Es sind alle gemessenen Betriebspunkte aus dem Fenster 1200 K bis 1250 K ausgewertet. Die Bandbreite der Streuung ist mit niedrigeren Geschwindigkeiten im Injektor deutlich höher. Erst mit Geschwindigkeiten von etwa 110 m/s bis 120 m/s ergeben sich NO_x -Emissionen im Bereich von 2 ppm. Dies lässt sich auf Mischungsschwankungen innerhalb des Frischgasstrahls zurückführen, da durch den WVMi keine perfekte Vormischung erreicht wird. Mit zunehmender Geschwindigkeit vergrößert sich der Grad der Verdünnung des Frischgases mit Abgas, wodurch ein Teil der Ungemischtheiten kompensiert werden kann. Beim Wasserstoffbetrieb ist daher neben der adiabaten Flammentemperatur auch der Luftmassenstrom als Einflussparameter zu berücksichtigen. Da es in allen Fällen bis 1150 K kein mageres Verlöschen der Brennkammer gab, wurde die magere Verlöschgrenze nicht näher experimentell bestimmt. Die minimale berechnete Turbineneintrittstemperatur liegt laut Tabelle 4.2 bei $T_4 \approx 1200$ K.

6.4 Transfer der Ergebnisse auf die Nennbedingungen der Mikrogasturbine

Der Druck in der Brennkammer der T100 beträgt bei Nennlast 4,5 bar. Daher werden die Ergebnisse aus den vorangegangenen Untersuchungen abschließend hinsichtlich des Druckeinflusses beurteilt. Die Betriebsgrenzen bei Umgebungsbedingungen definieren sich aus den Experimenten wie folgt:

- Im Wasserstoffbetrieb soll die Austrittsgeschwindigkeit am Injektor $\bar{u}_{inj} > 110$ m/s und $T_{ad,A} < 1275$ K sein, um die angestrebte Emissionsgrenze von 2 ppm für NO_x zuverlässig einzuhalten.
- Für den Erdgasbetrieb ist $T_{ad,A}$ der einzige Einflussparameter. Um NO_x -Emissionen < 1 ppm für die Erdgasverbrennung zu erreichen, muss $T_{ad,A} < 1550$ K sein. Um die Stabilität des Verbrennungsprozesses zu gewährleisten, müssen Betriebspunkte mit $T_{ad,A} > 1500$ K gewählt werden.

Zur Übersicht sind die Betriebspunkte der Optimierung aus Kapitel 4 und der Nennlastbetrieb der T100 bei 4,5 bar in Tabelle 6.3 zusammengefasst. In Tabelle 5.1 finden sich die entsprechenden Betriebspunkte bei Umgebungsbedingungen.

Tabelle 6.3: Übersicht Betriebspunkte der drei betrachteten Fälle bei 4,5 bar.

	γ	\dot{m}_L	\dot{m}_{Br}	\dot{Q}_{zu}	λ	T_V	T_{ad}	$T_{ad,A}$
	[-]	[g/s]	[g/s]	[W]	[-]	[K]	[K]	[K]
T100	0	800	6,89	333	7,0	894	1230	1533
	1	800	2,78	333	8,4	894	1230	-
T100+DBT	0	800	8,77	424	5,5	759	1195	1575
	1	800	3,53	424	6,6	759	1191	-
T100+NEC	0	800	7,28	352	6,6	861	1218	1537
	1	800	2,93	352	8,0	861	1215	-

In der Tabelle 6.3 ist für den Erdgasbetrieb jeweils noch die lokale adiabate Flammentemperatur in Stufe A $T_{ad,A}$ eingetragen. Der Berechnung von $T_{ad,A}$ ist die Annahme zugrunde gelegt, dass sich der gesamte Luftmassenstrom zu gleichen Teilen auf Stufe A und Stufe B verteilt. Für die Fälle T100 und T100+NEC befindet sich $T_{ad,A}$ innerhalb der geforderten Grenzen, um NO_x -Emissionen unter 1 ppm zu erreichen und gleichzeitig oberhalb der Stabilitätsgrenze von $T_{ad,A} = 1500$ K. $T_{ad,A}$ des Betriebspunktes T100+DBT liegt oberhalb der Emissionsgrenze, dort werden sich laut dem Reaktornetzwerkmodell aus Kapitel 5 etwa 1,5 ppm bis 2 ppm NO_x bilden. Rechnungen mit diesem Reaktornetzwerkmodell zeigen auch, dass sich die NO_x -Emissionen bei Brennkammerdruck kaum verändern. Dieses Verhalten deckt sich auch mit den Untersuchungen von Leonard und Stegmaier [140]. Abbildung 6.11 vergleicht die NO_x -Emissionen für die Drücke 1,0 bar und 4,5 bar für verschiedene adiabate Flammentemperaturen. Mayer et al. [79] zeigen, dass der Einfluss des Drucks bis 6 bar auf die magere Verlöschgrenze sehr gering ist. Das gestufte Konzept kann also mit Erdgas in den angegebenen Nennlastpunkten aus Tabelle 6.3 auch bei $p = 4,5$ bar betrieben werden.

Um den Druckeinfluss auf die NO_x -Emissionen und auf die Betriebssicherheit des Injektors im Wasserstoffbetrieb zu beurteilen, wird die Reaktivität des Ge-

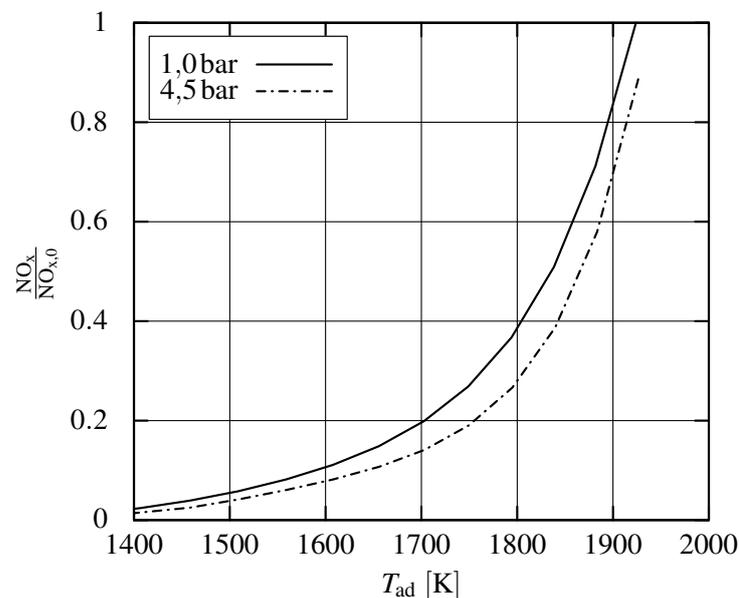


Abbildung 6.11: Einfluss des Drucks auf die Stickoxidemissionen im Erdgasbetrieb berechnet mit dem Reaktornetzwerkmodell. Die Werte sind normiert auf die Emissionen des Betriebspunkts $\lambda = 2$, $T_V = 894$ K bei Umgebungsbedingungen.

misches untersucht. Diese kann anhand zweier Größen beurteilt werden, der Zündverzugszeit und der Flammengeschwindigkeit. Diese Größen werden in Cantera mit dem Mechanismus nach Ó Conaire berechnet.

Die Zündverzugszeit τ_{SZ} ist in Abbildung 6.12 in Abhängigkeit von der Gemischtemperatur T_M dargestellt. Gezeigt sind die Verläufe für die Luftzahlen $\lambda = 1$, $\lambda = 4$ und $\lambda = 8$, jeweils für 1 bar und 4,5 bar. Im Bereich der Vorwärmtemperatur der drei Fälle aus Tabelle 6.3 zeigt sich, dass der Druckanstieg die Zündverzugszeit τ_{SZ} bis etwa 1100 K vergrößert, unabhängig von der Gemischzusammensetzung. Dies wirkt sich positiv auf die Betriebssicherheit des Injektors aus. Abbildung 6.13 zeigt die laminare Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit der adiabaten Flammentemperatur T_{ad} . Die Werte sind normiert auf einen Betriebspunkt mit 1740 K ($T_V = 873$ K, $\lambda = 3$) bei 1 bar. Es zeigt sich ein wesentlicher Einfluss der Vorwärmtemperatur bei 1 bar, der aber bei Brennkammerdruck geringer ausfällt. Vergleicht man die beiden Druckniveaus, wird s_l kleiner mit zunehmendem Druck. Auch dies kommt der Betriebssicherheit zu Gute, da durch die langsamere Brenngeschwindigkeit das Risiko verringert wird, dass sich die Flamme im Injektor stabilisiert.

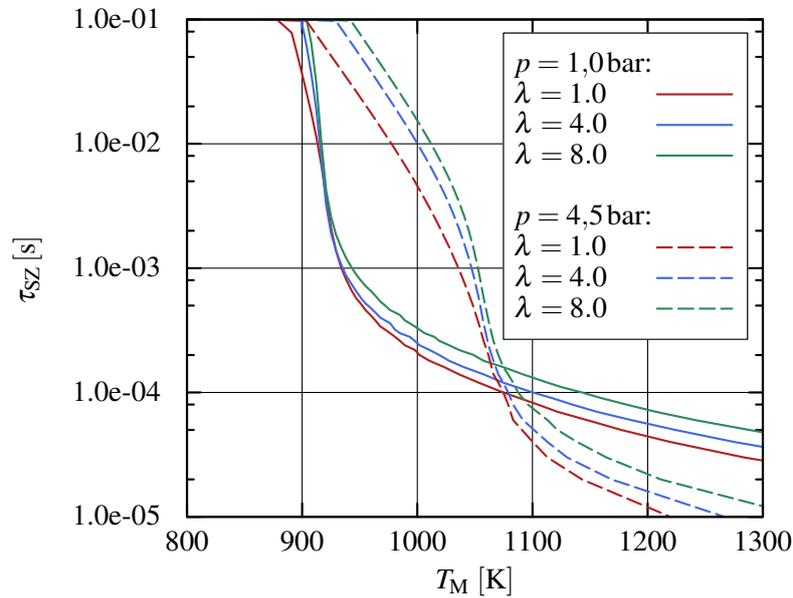


Abbildung 6.12: Zündverzugszeit τ_{SZ} eines Wasserstoff-Luft-Gemisches in Abhängigkeit von der Temperatur des Gemisches, berechnet für die Luftzahlen $\lambda = 1, 4$ und 8 , bei Umgebungsbedingungen und $4,5 \text{ bar}$.

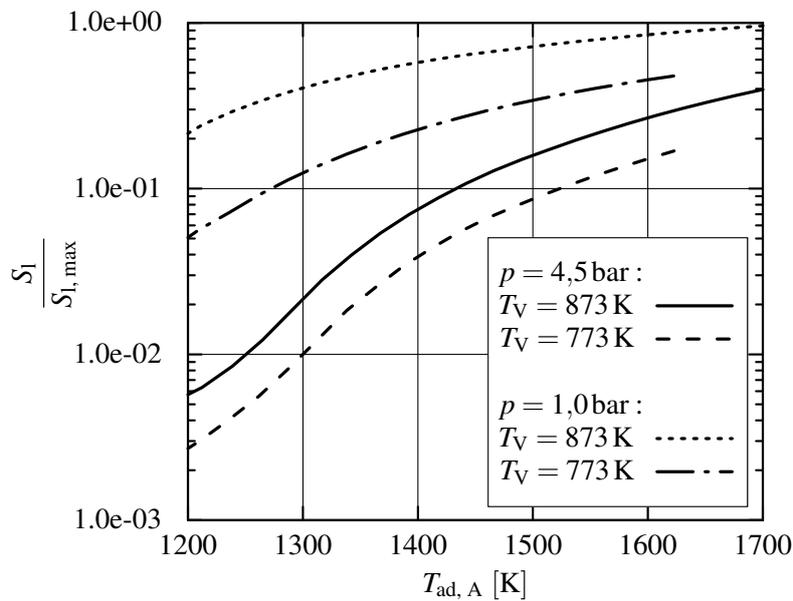


Abbildung 6.13: Druckabhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit für $\gamma = 1$ in Abhängigkeit der adiabaten Flammentemperatur $T_{ad, A}$.

Da sich im Experiment ein Einfluss der Eintrittsgeschwindigkeit auf die NO_x -Emissionen gezeigt hat, wird noch der Druckeinfluss auf die Mischungslänge des Frischgasstrahls mit Abgas in der Brennkammer abgeschätzt. Die Mischungslänge wird von der Abhebehöhe der Reaktionszone über der Eindüesestelle beeinflusst. Eine kleinere Abhebehöhe bedeutet auch gleichzeitig eine kleinere Mischungslänge, was sich negativ auf die NO_x -Emissionen auswirkt. Kolb et al. [66] zeigen ein Modell für die Abhebehöhe einer Erdgasflamme in einer Jet-In-Crossflow Konfiguration in Abhängigkeit von der Damköhler- und der Karlovitzzahl. Mit diesem Modell können auch Unmischtheiten berücksichtigt werden, da es die Zündverzugszeit der reaktivsten Mischung innerhalb des Frischgases berücksichtigt. Nach Kolb et al. [66] ist der Druckeinfluss auf die Abhebehöhe relativ klein, dennoch verkürzt sich die Mischungslänge ein wenig. Da diese Experimente mit konstanter Geschwindigkeit skaliert werden, sind höhere NO_x -Emissionen als im Experiment bei Umgebungsbedingungen zu erwarten. Um die erhöhten Emissionswerte zu kompensieren sollte der Austrittsquerschnitt der Injektoren verringert werden und die Mischungsgüte am Injektorausstritt für Wasserstoff optimiert werden.

Insgesamt zeigen die Überlegungen, dass das Brennkammerkonzept auch beim Brennkammerdruck von Mikrogasturbinen für den Betrieb mit Wasserstoff einsetzbar sein sollte, bei entsprechenden geometrischen Anpassungen auch mit ähnlichen NO_x -Emissionen.

7 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Verbrennung von Wasserstoff und Erdgas in einem gestuften Brennkammerkonzept für Mikrogasturbinen (MGT) im Kontext mit dezentralen Energiesystemen basierend auf chemischen Wasserstoffspeichern. Dabei war die Zielsetzung, ein Brennkammerkonzept zu entwickeln, das den Betrieb der MGT mit den beiden Brennstoffen Wasserstoff und Erdgas in einem Betriebsbereich zulässt, der sich für die Kopplung mit einem LOHC-Speicherzyklus eignet. Außerdem sollten die mit dem Verbrennungsprozess verbundenen NO_x -Emissionen im Bereich von maximal 1 ppm bis 2 ppm bleiben. Hierzu lagen aus einer früheren Arbeit für die VZPM-Brennkammer im Verbrennungsregime der verdünnten Verbrennung vielversprechende Ergebnisse für den Betrieb mit Erdgas vor.

Um die Randbedingungen für die Verbrennung festzulegen, wurde das Gesamtsystem in einem 0-D-Modell abgebildet und mit Hilfe von genetischen Algorithmen für den Vollastbetrieb optimiert. Als Grundlage dienten dafür der Parametersatz der realen Maschine Turbec T100 und die Speichermedien N-Ethylcarbazol (NEC) und Dibenzyltoluol (DBT). Optimierungsverfahren, die auf genetischen Algorithmen basieren, eignen sich besonders für Probleme mit vielen Designvariablen oder einem großen Suchraum. Daher wurde ein auf genetischen Algorithmen basierendes Optimierungsverfahren im Rahmen dieser Arbeit eingesetzt. Die Optimierung des elektrischen Wirkungsgrades zeigt, dass für das LOHC DBT ein deutlicher Eingriff in den Mikrogasturbinenprozess nötig ist, ein Betrieb aber dennoch möglich sein sollte. Für das LOHC NEC ergeben sich nur geringfügige Anpassungen. Für den weiteren Verlauf der Arbeit wurden drei Konfigurationen untersucht: T100 ohne Kopplung an den Speicherzyklus, T100+NEC und T100+DBT. Daraus ergeben sich für die Untersuchungen zur Verbrennung Vorwärmtemperaturen zwischen 480 - 620°C und globale Luftzahlen λ zwischen 6,6 und 8,4.

Die Untersuchungen zur verdünnten Verbrennung wurden bei Umgebungsdruck durchgeführt und teilen sich in zwei Phasen auf: zunächst wurde die VZPM-Brennkammer und dann eine im Rahmen dieser Arbeit weiterentwickelte, gestufte Variante untersucht.

Die erste Phase diente der Validierung des experimentellen Aufbaus und der entwickelten numerischen Methoden. Die numerischen Methoden bestehen aus einem Reaktornetzwerkmodell, das sich zur Vorhersage der NO_x -Emissionen für den Erdgasbetrieb eignet, und einem Modell zur numerischen Strömungssimulation, das zur Untersuchung des reagierenden Strömungsfeldes mit hohen Drallzahlen im Regime der verdünnten Verbrennung sowohl für Wasserstoff als auch für Erdgas verwendet werden kann. Die genannten Experimente und die numerischen Methoden konnten erfolgreich validiert werden.

Die zweite Phase diente der Bestimmung der Betriebscharakteristik der gestuften Brennkammer. Dabei wurde das gestufte Brennkammerkonzept zunächst mit den zuvor validierten numerischen Methoden zur Strömungssimulation untersucht. Dann wurde die Betriebscharakteristik der gestuften Brennkammer experimentell ermittelt. Die Ergebnisse aus Simulation und Experiment decken sich gut hinsichtlich der Interaktion zwischen den Stufen. Die wesentlichen Erkenntnisse aus den Experimenten sind:

Erdgas:

- Der stabile Betriebsbereich der gestuften Brennkammer für Erdgas liegt oberhalb der adiabaten Flammentemperatur $T_{\text{ad,A}} = 1500 \text{ K}$.
- Die Vorwärmtemperatur T_V und die Eintrittsgeschwindigkeit haben keinen messbaren Einfluss auf die NO_x -Emissionen im Erdgasbetrieb.
- Die NO_x -Emissionen im Erdgasbetrieb werden mit dem Netzwerkmodell gut abgebildet.

Wasserstoff:

- Mit einer Eintrittsgeschwindigkeit oberhalb von 110 m/s wird ein sicherer und reproduzierbarer Betriebsbereich erreicht. Bei geringeren Eintrittsgeschwindigkeiten schwanken die NO_x -Emissionen stark.

-
- Mit Betriebspunkten $T_{ad,A} < 1275 \text{ K}$ können NO_x -Emissionen im Bereich von 1 ppm bis 2 ppm erreicht werden.

Betrachtungen für den Betrieb bei einem Systemdruck von 4,5 bar zeigen, dass der Betrieb der Brennkammer bei Nennlast sowohl für Erdgas als auch für Wasserstoff möglich sein sollte.

A Weitere Ergebnisse der Simulation

Tabelle A.1: Randbedingung der Simulation T100+NEC und T100+DBT

Brennstoff	Massenstrom Stufe A [g/s]	Massenstrom Stufe B [g/s]	Luftzahl A [-]	Luftzahl B [-]	$T_{ad,A}$ [K]	$T_{ad,B}$ [K]	T_v [K]
A B CH4 T100+NEC							
Methan	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 86,9	\dot{m}_L 85,3	3,3	-	1539	-	861
A B H2 T100+NEC							
Wasserstoff	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 85,6	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 85,6	8,0	8,0	1215	1215	861
A B CH4 T100+DBT							
Methan	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 87,2	\dot{m}_L 85,3	2,7	-	1577	-	759
A B H2 T100+DBT							
Wasserstoff	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 85,7	$\dot{m}_L + \dot{m}_{Br}$ 85,7	6,6	6,6	1191	1191	759

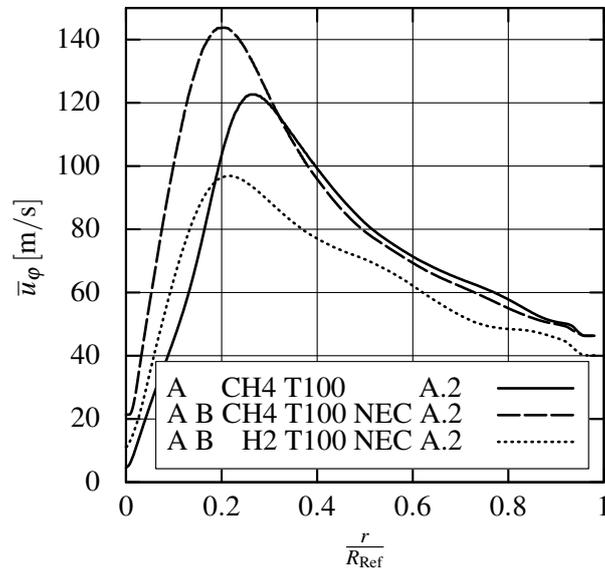


Abbildung A.1: Geschwindigkeitsprofile Tangentialgeschwindigkeit T100+NEC.

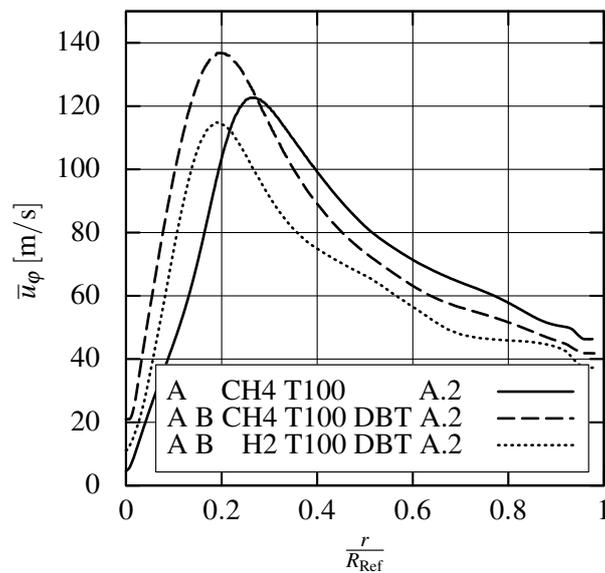


Abbildung A.2: Geschwindigkeitsprofile Tangentialgeschwindigkeit T100+DBT.

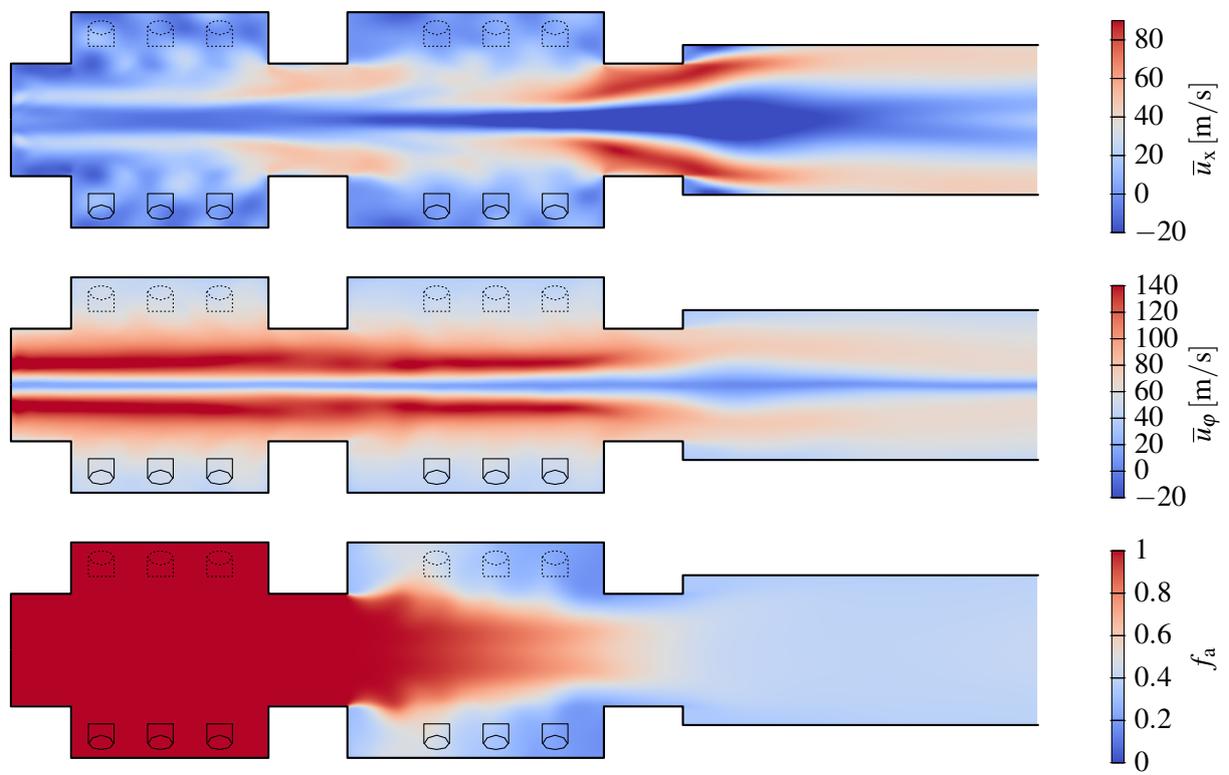


Abbildung A.3: Betriebspunkt A B CH4 T100+NEC.

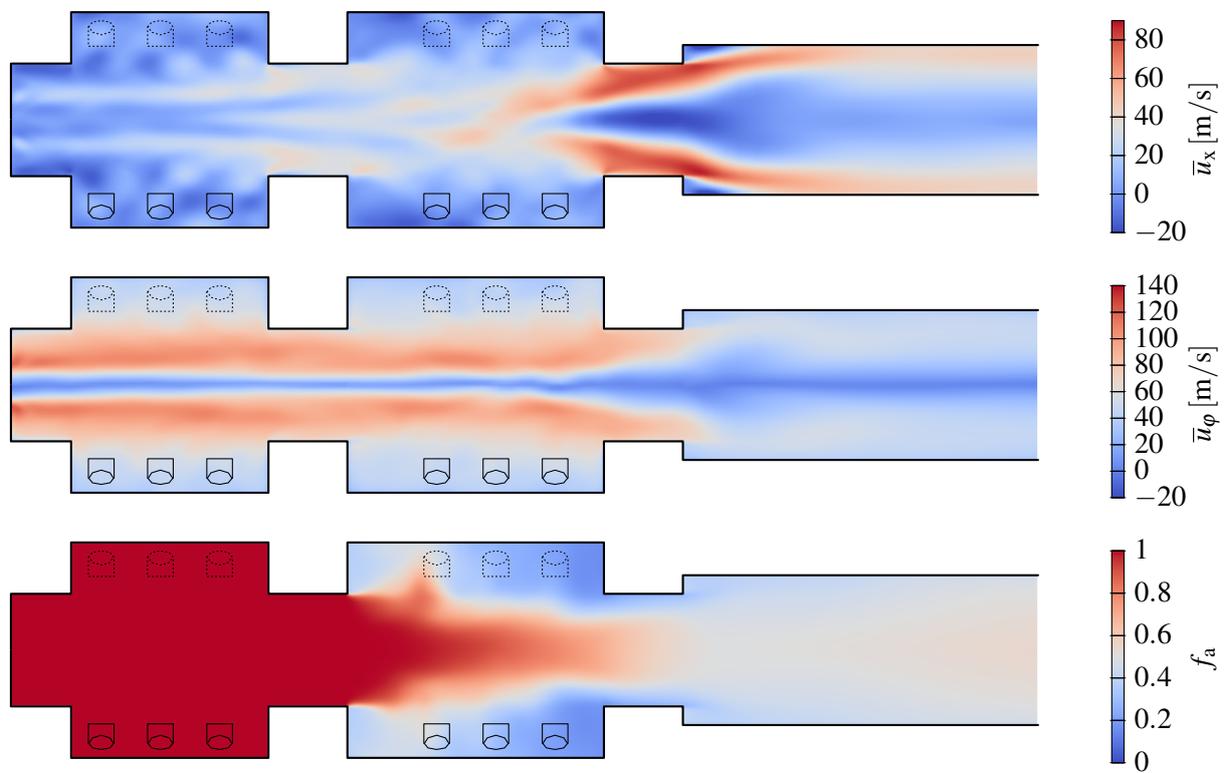


Abbildung A.4: Betriebspunkt A B H2 T100+NEC.

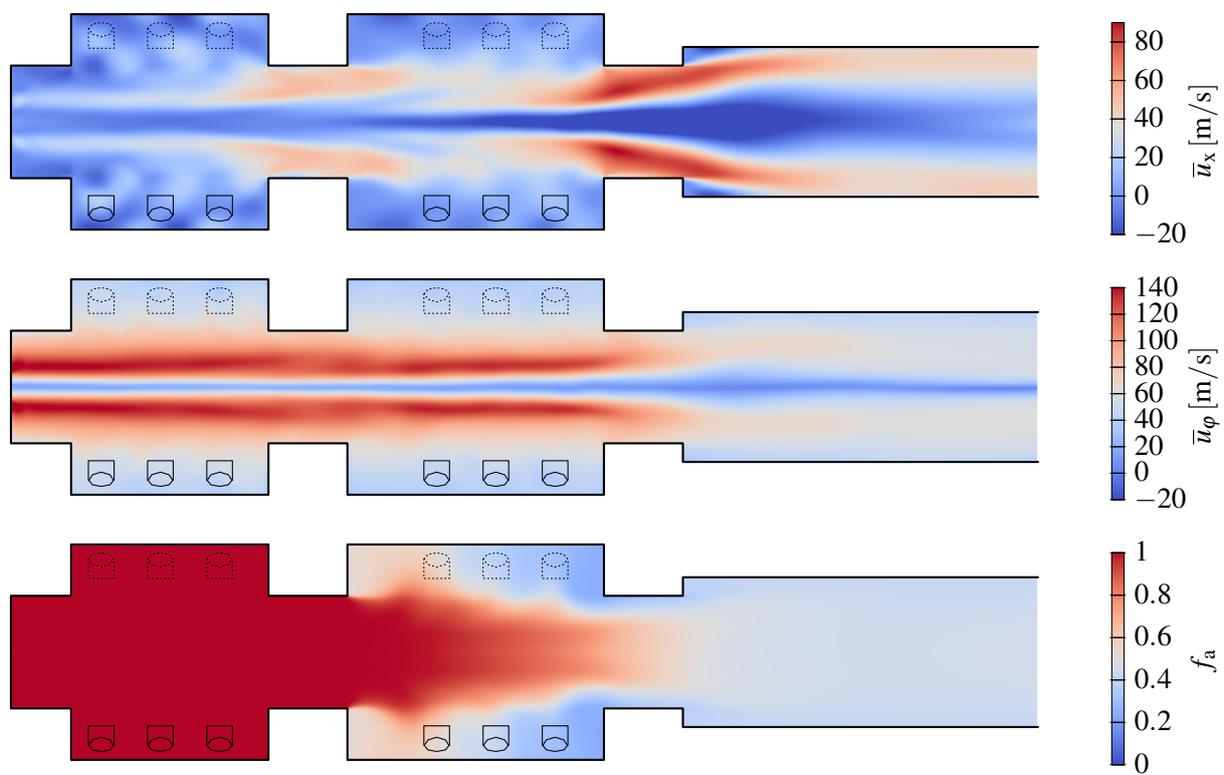


Abbildung A.5: Betriebspunkt A B CH4 T100+DBT.

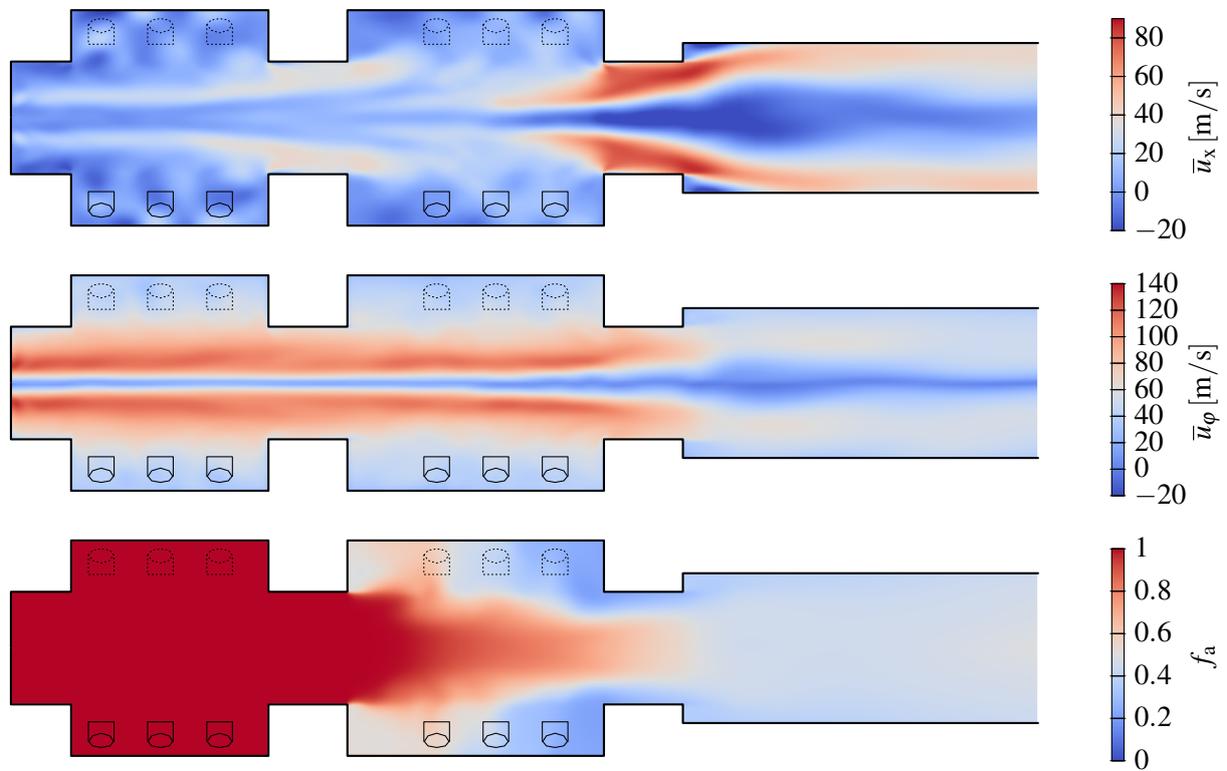


Abbildung A.6: Betriebspunkt A B H2 T100+DBT.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Speicherzyklus von Wasserstoff in LOHC.	4
1.2	Schema der Stoffflüsse zwischen Mikrogasturbine (MGT) und Dehydriereinheit (DE).	6
1.3	Zündverzugszeiten τ_{SZ} für Erdgas und Wasserstoff berechnet für Luftzahlen $\lambda = 1$ und $\lambda = 2$, aufgetragen über die Gemischtemperatur.	7
1.4	Normierte laminare Flammgeschwindigkeit $s_1/s_{1,0}$ für Erdgas und Wasserstoff in Abhängigkeit von der adiabaten Flammentemperatur des Betriebspunktes bei Umgebungsbedingungen.	7
2.1	Prozessschema und T-s Diagramm eines offenen Gasturbinenprozesses.	12
2.2	Prozessschema und T-s Diagramm eines offenen rekuperierten Gasturbinenprozesses.	13
2.3	Schematische Darstellung des Bilanzraumes mit der entsprechenden Kennzeichnung der Terme der Gleichung (2.10) und Gleichung (2.12).	17
2.4	Skizze eines kontinuierlich durchströmten Rohrreaktors und der dazugehörige Verlauf der Konzentration in Abhängigkeit von Zeit und Ort.	19
2.5	Skizze eines Rührkesselreaktors und der Vergleich der Konzentrationsverläufe im kontinuierlichen und diskontinuierlichen Betrieb.	21
2.6	Schematische Darstellung des Aufbaus eines Chromosoms.	26
2.7	Schematische Darstellung der Selektionsmethode Stochastic Universal Sampling.	29
2.8	Überblick über die Möglichkeiten der Herkunft / Entstehung der Kindgeneration (nach [78]).	30

3.1	Skizze des Brenners nach Wüning [130].	36
3.2	Schematische Darstellung der Verbrennungsregimes abhängig von der Rezirkulationsrate und der Brennkammertemperatur nach Wüning [130]: A - konventionelle Flamme, B - instabiler Bereich, C - Regime der verdünnten Verbrennung.	37
3.3	Einteilung der Verbrennungsregime nach Cavaliere und de Joannon [27] und Dunn-Rankin [35] in Abhängigkeit von der Reaktantentemperatur und dem Temperaturhub während des Verbrennungsprozesses.	38
3.4	Schematische Darstellung der Brennkammer der Turbec T100. . .	40
3.5	Schematische Darstellung der Brennkammer der Captstone C60 (nach [20]).	40
3.6	Schematische Darstellung der Brennkammer des DLR Stuttgart (nach [20]).	41
3.7	Schematische Darstellung der VZPM-Brennkammer und des Verbrennungskonzeptes der zyklisch-periodischen Mischung.	42
3.8	Schematische Darstellung des Mischkonzepts des Wirbelvormischinjektors (WVMI).	43
3.9	Qualitativer Verlauf der Tangentialgeschwindigkeit für den Rankine-Wirbel und den Hamel-Oseen-Wirbel.	46
3.10	Qualitativer Verlauf der Axialgeschwindigkeit abhängig von der Drallzahl.	46
3.11	Gedachte Aufteilung einer RANS Rechenzelle in einen lokal laminar reagierenden Anteil und eine Umgebung in der lediglich Mischvorgänge stattfinden.	50
4.1	Prozessschema der Kopplung von Mikrogasturbine und Dehydriereinheit.	54
4.2	Detaillierte Darstellung des Prozessschemas der Dehydriereinheit.	56
4.3	Flussdiagramm des Optimierungsvorgangs des Gesamtsystems. .	60
4.4	Einfluss der Randbedingungen in der Fitnesslandschaft.	64
4.5	Werte der Fitnessfunktion für NEC in Abhängigkeit von Bypassverhältnis und Brennstoffmassenstrom der MGT. Der Kreis kennzeichnet die Lage des Optimums.	65

4.6	Werte der Fitnessfunktion für DBT in Abhängigkeit von Bypassverhältnis und Brennstoffmassenstrom der MGT. Der Kreis kennzeichnet die Lage des Optimums.	65
4.7	Freigesetzter Brennstoffmassenstrom aus dem Reaktor für verschiedene Bypassverhältnisse, aufgetragen über den LOHC-Massenstrom (NEC).	67
5.1	Schematische Darstellung der Medienströme im Versuchsaufbau. .	71
5.2	Abbildung der VZPM-Brennkammer und Schnitt durch das Volumenmodell (nach [83]).	72
5.3	Vergleich der Experimente für Erdgas mit Daten von Brückner-Kalb [20].	77
5.4	NO _x -Emissionen in Abhängigkeit von T _{ad,A} (T _V = 773 K, γ = 0...1). .	78
5.5	Reaktornetzwerkmodell der VZPM-Brennkammer.	79
5.6	Validierung der NO _x -Emissionen in Abhängigkeit von T _{ad,A} (T _V = 773 K, γ = 0...1) aus Abbildung 5.5.	80
5.7	Vergleich der berechneten Zündverzugszeiten τ _{SZ} mit experimentellen Daten.	82
5.8	Positionen der Schnittebenen in Experiment und Simulation und der Fensterausschnitt der PIV-Messungen.	83
5.9	Validierung der Simulation mit PIV-Daten (links) und dem analytischen Modell (rechts). Betriebspunkt: A CH ₄ Val (siehe Tabelle 5.6).	84
5.10	A CH ₄ Val: Zeitlich gemittelte Konturplots der Schnitte längs der Brennkammer und in der Ebene A.2 _{inj}	86
5.11	A H ₂ 1250K: Konturplots der Schnitte längs der Brennkammer und in der Ebene A.2 _{inj}	87
5.12	Tangentiales Geschwindigkeitsprofil des Betriebspunktes mit Wasserstoff A H ₂ 1250K (vgl. Tabelle 5.7) im Vergleich mit dem Modell.	88
6.1	Darstellung des gestuften Brennkammer im Schnitt mit den zugehörigen Abkürzungen und Bezeichnungen (nach [83]).	93

6.2	Vergleich des Verlaufs der Tangentialgeschwindigkeiten der VZPM-Brennkammer und des gestuften Konzepts für Erdgas und Wasserstoff.	95
6.3	A B H ₂ T100: Konturplots der gestuften Brennkammer im Betrieb mit Wasserstoff	96
6.4	A B CH ₄ T100: Konturplots der gestuften Brennkammer im Betrieb mit Erdgas.	97
6.5	Vergleich des Einflusses der Geschwindigkeit am Austritt des Injektors für Erdgas und Wasserstoff in der Ebene $A.2_{inj}$	98
6.6	Vergleich der Messdaten der gestuften Brennkammer mit den Ergebnissen der VZPM-Brennkammer für Erdgas und Vorwärmtemperatur von 773 K und 873 K.	101
6.7	Vergleich der Stickoxidemissionen mit den Ergebnissen aus dem Reaktornetzwerkmodell für $\gamma = 0$	101
6.8	Stabilitätskarte der gestuften Brennkammer für $\gamma = 0$	102
6.9	Einfluss der adiabaten Flammentemperatur auf die Stickoxidemissionen für Wasserstoff.	103
6.10	Einfluss der mittleren Austrittsgeschwindigkeit \bar{u}_{inj} auf die Stickoxidemissionen für Wasserstoff im Betriebsbereich $T_{ad,A} = 1200$ K bis 1250 K.	103
6.11	Einfluss des Drucks auf die Stickoxidemissionen im Erdgasbetrieb berechnet mit dem Reaktornetzwerkmodell. Die Werte sind normiert auf die Emissionen des Betriebspunkts $\lambda = 2$, $T_V = 894$ K bei Umgebungsbedingungen.	106
6.12	Zündverzugszeit τ_{SZ} eines Wasserstoff-Luft-Gemisches in Abhängigkeit von der Temperatur des Gemisches, berechnet für die Luftzahlen $\lambda = 1, 4$ und 8 , bei Umgebungsbedingungen und $4,5$ bar.	107
6.13	Druckabhängigkeit der laminaren Flammengeschwindigkeit für $\gamma = 1$ in Abhängigkeit der adiabaten Flammentemperatur T_{ad} . . .	107
A.1	Geschwindigkeitsprofile Tangentialgeschwindigkeit T100+NEC. .	114
A.2	Geschwindigkeitsprofile Tangentialgeschwindigkeit T100+DBT. .	114
A.3	Betriebspunkt A B CH ₄ T100+NEC.	115
A.4	Betriebspunkt A B H ₂ T100+NEC.	116

A.5 Betriebspunkt A B CH ₄ T100+DBT.	117
A.6 Betriebspunkt A B H ₂ T100+DBT.	118

Tabellenverzeichnis

1.1	Übersicht über eine Auswahl verschiedener Wasserstoffspeichertechnologien nach [16].	2
1.2	Kommerziell erhältliche Mikrogasturbinen und deren Kennzahlen nach [25, 26, 37, 39].	5
2.1	Stoffdaten der Paarung N-Ethylcarbazol/Perhydro-N-Ethylcarbazol [19, 82, 92, 121].	15
2.2	Stoffdaten der Paarung Dibenzyltoluol/Perhydro-Dibenzyltoluol [19, 82, 92, 93].	16
2.3	Vergleich der wichtigsten Begriffe aus der Biologie mit denen der Algorithmen [46, 96].	26
3.1	Einteilung der Verbrennungsregime anhand der Reaktandentemperatur T_{Reakt} , der Selbstzündtemperatur T_{SZ} und des Temperaturhubs während der Verbrennung ΔT (nach [15, 27]).	38
4.1	Konstanten der Reaktionskinetik für die Dehydrierung nach [43, 44, 106].	57
4.2	Ergebnisse der Optimierung für die beiden LOHC NEC und DBT.	64
5.1	Skalierte Randbedingungen der Nennlastbetriebspunkte der betrachteten Konfigurationen der MGT T100.	70
5.2	Abmessungen der Versuchsbrennkammer.	73
5.3	Betriebsbereiche der Medienströme.	74
5.4	Module des Abgasanalysators mit den jeweiligen Kalibrierbereichen, Kalibriermethoden und Messbereichen [2, 15, 83].	75
5.5	Zusammenfassung der verwendeten Modelle und Diskretisierungsschemata.	81

5.6	Betriebspunkt A CH ₄ Val nach Kappes [60] zur Validierung des CFD-Setups.	86
5.7	Betriebspunkt A H ₂ 1250K für Wasserstoffbetrieb der VZPM-Brennkammer.	87
6.1	Randbedingung der Simulation T100.	95
6.2	Der Betriebspunkte zur Beurteilung des Einflusses der Geschwindigkeit am Austritt des Injektors in Abbildung 6.5.	99
6.3	Übersicht Betriebspunkte der drei betrachteten Fälle bei 4,5 bar. . .	105
A.1	Randbedingung der Simulation T100+NEC und T100+DBT . . .	113

Literaturverzeichnis

- [1] C. Abagnale, M. C. Cameretti, R. de Robbio und R. Tuccillo: *CFD Study of a MGT Combustor Supplied with Syngas*. Energy Procedia, 101:933–940, 2016.
- [2] ABB: *Advance Optima Kontinuierliche Gasanalysatoren AO2000 Serie: Betriebsanleitung (Druckschrift-Nr. 42/24-10 DE Rev. 9)*, 2009.
- [3] S. V. Alekseenko, P. A. Kuibin, V. L. Okulov und S. I. Shtork: *Helical Vortices in Swirl Flow*. Journal of Fluid Mechanics, 382:195–243, 1999.
- [4] J. Aminian, C. Galletti, S. Shahhosseini und L. Tognotti: *Numerical Investigation of a MILD Combustion Burner: Analysis of Mixing Field, Chemical Kinetics and Turbulence-Chemistry Interaction*. Flow, Turbulence and Combustion, 88(4):597–623, 2012.
- [5] J. Aminian, C. Galletti und L. Tognotti: *Extended EDC Local Extinction Model Accounting Finite-Rate Chemistry for MILD Combustion*. Fuel, 165:123–133, 2016.
- [6] ANSYS FLUENT: *ANSYS Fluent 14.0 Theory Guide*. 2009.
- [7] V. K. Arghode: *Development of Colorless Distributed Combustion for Gas Turbine Application*. Dissertation, University of Maryland, 2011.
- [8] T. Bäck und F. Hoffmeister: *Extended Selection Mechanisms in Genetic Algorithms*. ICGA, S. 92–99, 1991.
- [9] H. D. Baehr und K. Stephan: *Wärme- und Stoffübertragung*. Springer, Berlin, 5., neu bearbeitete Aufl., 2006.

- [10] M. Baerns: *Technische Chemie*. Wiley-VCH, Hoboken, 2. Aufl., 2013.
- [11] J.E. Baker: *Reducing Bias and Inefficiency in the Selection Algorithm*. Proceedings of the Second International Conference on Genetic Algorithms on Genetic Algorithms and Their Application, S. 14–21, 1987.
- [12] S. Bauer, S. Bäßler, B. Hampel, C. Hirsch und T. Sattelmayer: *Mixture Quality of a Vortex Generator Premixer an Alternative Premixer Designs in the Auto-Ignition Regime of Hydrogen Air Flames*. Proceedings of ASME Turbo Expo, 2017.
- [13] S. Bauer, B. Hampel und T. Sattelmayer: *Operability Limits of Tubular Injectors with Vortex Generators for a Hydrogen Fuelled Recuperated 100 KW Class Gas Turbine*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 139:082607–082607–8, 2017.
- [14] J.M. Beér und N. A. Chigier: *Combustion Aerodynamics*. Fuel and energy science series. Applied Science Publishers Ltd, London, 1972.
- [15] M. Bosch: *Experimentelle Untersuchungen zur Schadstoffreduzierung an einer Brennkammer mit zyklisch-periodischer Mischung*. Masterarbeit, Lehrstuhl für Thermodynamik, TU München, 2016.
- [16] B. Bowman und L. Klebanoff: *Hydrogen Storage Technology: Materials and Applications*. CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, 2013.
- [17] J.W. Bozzelli und A.M. Dean: *O + NNH: A Possible New Route for NO_x Formation in Flames*. International Journal of Chemical Kinetics, 27(11):1097–1109, 1995.
- [18] J. Braun: *Thermodynamische Grundlagen*. In: C. Lechner und J. Seume (Hrsg.): *Stationäre Gasturbinen*, S. 11–47. Springer, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [19] N. Brückner, K. Obesser, A. Bösmann, D. Teichmann, W. Arlt, J. Dungs und P. Wasserscheid: *Evaluation of Industrially Applied Heat-Transfer Fluids as Liquid Organic Hydrogen Carrier Systems*. ChemSusChem, 7(1):229–235, 2014.

- [20] J. R. Brückner-Kalb: *Sub-ppm-NO_x-Verbrennungsverfahren für Gasturbinen*. Dissertation, TU München, München, 2007.
- [21] J. R. Brückner-Kalb, M. Krösser, C. Hirsch und T. Sattelmayer: *Emission Characteristics of a Premixed Cyclic-Periodical-Mixing Combustor Operated With Hydrogen-Natural Gas Fuel Mixtures*. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 132(2):021505, 2010.
- [22] J. R. Brückner-Kalb, C. Napravnik, C. Hirsch und T. Sattelmayer: *Development of a Fuel-Air Premixer for a Sub-ppm NO_x Burner*. *Proceedings of ASME Turbo Expo*, 2007.
- [23] B. Busenthür: *Gleichgewichtszustand drallbehafteter Strömungen in zylindrischen, geraden Rohren*, Bd. 137 d. Reihe *Strömungstechnik*. VDI Verlag, Düsseldorf, 1988.
- [24] S. Byggstoyl und B. F. Magnussen: *A Model for Flame Extinction in Turbulent Flow*. In: *Fourth Symposium on Turbulent Shear Flows, September 12-14, 1983, Karlsruhe, Germany*, 1983.
- [25] Capstone Turbine Corporation: *Technical Reference: Capstone Model C60 Performance*, 2004.
- [26] Capstone Turbine Corporation: *C30 Natural Gas Data Sheet CAP135*, 2010.
- [27] A. Cavaliere und M. de Joannon: *Mild Combustion*. *Progress in Energy and Combustion Science*, 30(4):329–366, 2004.
- [28] S. M. Correa: *A Review of NO_x Formation Under Gas-Turbine Combustion Conditions*. *Combustion Science and Technology*, 87(1-6):329–362, 1993.
- [29] R. Crabtree: *Hydrogen Storage in Liquid Organic Heterocycles*. *Energy & Environmental Science*, 1(1):134–138, 2008.
- [30] R. R. Craig: *A Shock Tube Study of the Ignition Delay of Hydrogen-Air Mixtures Near the Second Explosion Limit*. *Air Force Aero Propulsion Laboratory Research and Technology Division*, (AFAPL-TR-66-74), 1966.

- [31] M. R. Davidson: *Numerical Calculations of Flow in a Hydrocyclone Operating without an Air Core*. Applied Mathematical Modeling, 12:119–128, 1988.
- [32] A. De, E. Oldenhof, P. Sathiah und D. Roekaerts: *Numerical Simulation of Delft-Jet-in-Hot-Coflow (DJHC) Flames Using the Eddy Dissipation Concept Model for Turbulence–Chemistry Interaction*. Flow, Turbulence and Combustion, 87(4):537–567, 2011.
- [33] J. J. Derksen und H. E. A. van den Akker: *Simulation of Vortex Core Precession in a Reverse-Flow Cyclone*. AIChE Journal, 46:1317–1331, 2000.
- [34] M. A. R. do Nascimento, L. de Oliveira Rodrigues, E. C. dos Santos, E. E. Batista Gomes, F. L. G. Dias, E. I. Gutierrez Velsques und R. A. M. Carillo: *Micro Gas Turbine Engine: A Review*. In: E. Benini (Hrsg.): *Progress in Gas Turbine Performance*. InTech, 2013.
- [35] D. Dunn-Rankin: *Lean Combustion: Technology and Control*. Elsevier Science, Burlington, 2011.
- [36] A. Effuggi, D. Gelosa, M. Derudi und R. Rota: *Mild Combustion of Methane-Derived Fuel Mixtures: Natural Gas and Biogas*. Combustion Science and Technology, 180(3):481–493, 2008.
- [37] Elliott Energy Systems: *100 kW CHP Microturbine - EESI #51 Rev. 1*, 2005.
- [38] G. Emig und E. Klemm: *Chemische Reaktionstechnik*. Springer-Lehrbuch. Springer Vieweg, Berlin, 6., neu bearbeitete Aufl., 2017.
- [39] Ensola Energy Solutions: *Technical Description Microturbine Turbec T100*, 2006.
- [40] I. S. Ertesvag und B. F. Magnussen: *The Eddy Dissipation Turbulence Energy Cascade Model*. Combustion Science and Technology, 159(1):213–235, 2000.
- [41] C. P. Fenimore: *Formation of Nitric Oxide in Premixed Hydrocarbon Flames*. Symposium (International) on Combustion, 13(1):373–380, 1971.

- [42] M. Ferrarotti, D. Lupant und A. Parente: *Analysis of a 20 kW Flameless Furnace Fired with Natural Gas*. Energy Procedia, 120:104–111, 2017.
- [43] A. Fikrt, R. Brehmer, V.O. Milella, K. Müller, A. Bösmann, P. Preuster, N. Alt, E. Schlücker, P. Wasserscheid und W. Arlt: *Dynamic Power Supply by Hydrogen Bound to a Liquid Organic Hydrogen Carrier*. Applied Energy, 194:1–8, 2017.
- [44] J. Fochler: *Numerische Untersuchung der Kopplung einer Mikrogasturbine mit einer Dehydriereinheit für LOHC*. Semesterarbeit, Lehrstuhl für Thermodynamik, TU München, 2016.
- [45] Gas Research Institute: *The Role of Distributed Generation in Competitive Energy Markets*. Distributed Generation Forum, 1999.
- [46] I. Gerdes, F. Klawonn und R. Kruse: *Evolutionäre Algorithmen: Genetische Algorithmen - Strategien und Optimierungsverfahren - Beispielanwendungen*. Computational Intelligence. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 2004.
- [47] P. Gerlinger: *Numerische Verbrennungssimulation: Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung*. Springer, Berlin, 2005.
- [48] I. R. Gran und B. F. Magnussen: *A Numerical Study of a Bluff-Body Stabilized Diffusion Flame. Part 2. Influence of Combustion Modeling And Finite-Rate Chemistry*. Combustion Science and Technology, 119(1-6):191–217, 1996.
- [49] A. K. Gupta: *Flame Characteristics and Challenges With High Temperature Air Combustion*. Proceedings of International Joint Power Generation Conference, 2000.
- [50] A. K. Gupta: *Flame Characteristics with High Temperature Air Combustion*. 38th Aerospace Sciences Meeting, 2000.
- [51] A. Haj Ayed, K. Kusterer, H. W. Funke, J. Keinz, C. Striegan und D. Bohn: *Experimental and Numerical Investigations of the Dry-Low-NO_x Hydrogen Micromix Combustion chamber of an industrial gas turbine*. Propulsion and Power Research, 4(3):123–131, 2015.

- [52] B. Hampel, S. Bauer, N. Heublein, C. Hirsch und T. Sattelmayer: *Feasibility Study on Dehydrogenation of LOHC Using Excess Exhaust Heat From a Hydrogen Fueled Micro Gas Turbine*. Proceedings of ASME Turbo Expo, 2015.
- [53] T. Hasegawa, S. Mochida und A. K. Gupta: *Development of Advanced Industrial Furnace Using Highly Preheated Combustion Air*. Journal of Propulsion and Power, 18(2):233–239, 2002.
- [54] A. N. Hayhurst und E. M. Hutchinson: *Evidence for a New Way of Producing NO via NNH in Fuel-Rich Flames at Atmospheric Pressure*. Combustion and Flame, 114(1-2):274–279, 1998.
- [55] M. Hirscher: *Handbook of Hydrogen Storage: New Materials for Future Energy Storage*. Wiley-VCH, Weinheim, 2010.
- [56] A. J. Hoekstra, J. J. Derksen und H. E. A. van den Akker: *An Experimental and Numerical Study of Turbulent Swirling Flow in Gas Cyclones*. Chemical Engineering Science, 54:2055–2065, 1999.
- [57] V. Hösl: *Inbetriebnahme und Gefährdungsbeurteilung eines Brennkammerversuchsstands mit zyklisch-periodischer Mischung*. Bachelorarbeit, Lehrstuhl für Thermodynamik, TU München, 2014.
- [58] O. Ibrahim, P. Zimmermann, C. Hirsch, T. Sattelmayer, B. Gerhard und C. Steinbach: *A Microturbine Operating With Variable Heat Output*. Proceedings of ASME Turbo Expo, 2004.
- [59] M. de Joannon, A. Saponaro und A. Cavaliere: *Zero-Dimensional Analysis of Diluted Oxidation of Methane in Rich Conditions*. Proceedings of the Combustion Institute, 28(2):1639–1646, 2000.
- [60] C. Kappes: *Bestimmung des Geschwindigkeitsfeldes und des Reaktionsfeldes in der Sub-ppm-NO_x Vorbrennkammer*. Diplomarbeit, Lehrstuhl für Thermodynamik, TU München, 2005.
- [61] F. Kaya und I. Karagoz: *Performance Analysis of Numerical Schemes in Highly Swirling Turbulent Flows in Cyclones*. Current Science, 94(10):1273–1278, 2008.

- [62] J. Kesseli, T. Wolf, J. Nash und S. Freedman: *Micro, Industrial, and Advanced Gas Turbines Employing Recuperators*. Proceedings of ASME Turbo Expo, 2003.
- [63] A. E. Khalil: *Investigation of Colorless Distributed Combustion (CDC) with Swirl for Gas Turbine Application*. Dissertation, University of Maryland, 2013.
- [64] A. E. Khalil und A. K. Gupta: *Swirling Distributed Combustion for Clean Energy Conversion in Gas Turbine Applications*. Applied Energy, 88(11):3685–3693, 2011.
- [65] L. Klebanoff: *Hydrogen Storage Technology: Materials and Applications*. Taylor & Francis, Boca Raton, 2013.
- [66] M. Kolb, D. Ahrens, C. Hirsch und T. Sattelmayer: *A Model for Predicting the Lift-Off Height of Premixed Jets in Vitiated Cross Flow*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 138(8):081901, 2016.
- [67] A. A. Konnov: *Remaining Uncertainties in the Kinetic Mechanism of Hydrogen Combustion*. Combustion and Flame, 152(4):507–528, 2008.
- [68] O. Lammel, H. Schütz, G. Schmitz, R. Lückcrath, M. Stöhr, B. Noll, M. Aigner, M. Hase und W. Krebs: *FLOX® Combustion at High Power Density and High Flame Temperatures*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 132(12), 2010.
- [69] C. Lechner und J. Seume: *Stationäre Gasturbinen*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [70] M. T. Lewandowski und I. S. Ertesvåg: *Analysis of the Eddy Dissipation Concept Formulation for MILD Combustion Modelling*. Fuel, 224:687–700, 2018.
- [71] J. Li, Z. Zhao, A. Kazakov und F. L. Dryer: *An Updated Comprehensive Kinetic Model of Hydrogen Combustion*. International Journal of Chemical Kinetics, 36(10):566–575, 2004.

- [72] P. Li, J. Mi, B. B. Dally, F. Wang, L. Wang, Z. Liu, S. Chen und C. Zheng: *Progress and Recent Trend in MILD Combustion*. Science China Technological Sciences, 54(2):255–269, 2011.
- [73] T. Lieuwen, V. McDonnell, E. Petersen und D. Santavicca: *Fuel Flexibility Influences on Premixed Combustor Blowout, Flashback, Autoignition, and Stability*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 130(1):011506, 2008.
- [74] D. G. Lilley: *Swirl Flows in Combustion: A Review*. AIAA Journal, 15(8):1063–1078, 1977.
- [75] R. Lückcrath, W. Meier und M. Aigner: *FLOX® Combustion at High Pressure With Different Fuel Compositions*. Proceedings of ASME Turbo Expo, 2007.
- [76] B. F. Magnussen: *On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept For Chemical Reaction in Turbulent Flow*. 19th Aerospace Sciences Meeting, 1981.
- [77] B. F. Magnussen und B. H. Hjertager: *On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion*. Symposium (International) on Combustion, 16(1):719–729, 1977.
- [78] MATLAB: *Global Optimization Toolbox: User's Guide (R2015b)*. The MathWorks Inc., 2015.
- [79] C. Mayer, J. Sangl, T. Sattelmayer, T. Lachaux und S. Bernero: *Study on the Operational Window of a Swirl Stabilized Syngas Burner Under Atmospheric and High Pressure Conditions*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 134(3), 2012.
- [80] A. Milani und J. G. Wüning: *Flameless Oxidation Technology*. 29th Meeting on Combustion, Italian Section of the Combustion Institute, 2006.
- [81] A. Moores, M. Poyatos, Y. Luo und R. H. Crabtree: *Catalysed Low Temperature Hydrogen Release from Nitrogen Heterocycles*. New Journal of Chemistry, 30(11):1675, 2006.

- [82] K. Müller, K. Stark, V.N. Emel'yanenko, M.A. Varfolomeev, D.H. Zaitsau, E. Shoifet, C. Schick, S.P. Verevkin und W. Arlt: *Liquid Organic Hydrogen Carriers: Thermophysical and Thermochemical Studies of Benzyl- and Dibenzyl-toluene Derivatives*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 54(32):7967–7976, 2015.
- [83] M. Nettinger: *Experimentelle Untersuchungen zur Schadstoffreduzierung an einer axial gestuften Brennkammer mit verdünnter Verbrennung*. Masterarbeit, Lehrstuhl für Thermodynamik, TU München, 2016.
- [84] V. Nissen: *Einführung in evolutionäre Algorithmen*. Vieweg, Braunschweig, 1997.
- [85] M. Ó Conaire, H. J. Curran, J. M. Simmie, W. J. Pitz und C. K. Westbrook: *A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation*. International Journal of Chemical Kinetics, 36(11):603–622, 2004.
- [86] A. Parente, C. Galetti und L. Tognotti: *Effect of the Combustion Model and Kinetic Mechanism on the MILD Combustion in an Industrial Burner Fed with Hydrogen Enriched Fuels*. International Journal of Hydrogen Energy, 33(24):7553–7564, 2008.
- [87] K. A. Pericleous: *Mathematical Simulation of Hydrocyclones*. Applied Mathematical Modeling, 11:242–255, 1987.
- [88] N. Peters: *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2000.
- [89] T. Plessing, N. Peters und J. G. Wüning: *Laseroptical Investigation of Highly Preheated Combustion with Strong Exhaust Gas Recirculation*. Symposium (International) on Combustion, 27(2):3197–3204, 1998.
- [90] S. B. Pope: *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2015.
- [91] M. Pourhasanzadeh und S. Bigham: *Optimization of a Micro Gas Turbine Using Genetic Algorithm*. Proceedings of ASME Turbo Expo, 2011.
- [92] P. Preuster: *Entwicklung eines Reaktors zur Dehydrierung chemischer Wasserstoffträger als Bestandteil eines dezentralen, stationären Energiespeichers*. Dissertation, FAU Erlangen, Erlangen, 2017.

- [93] P. Preuster, A. Alekseev und P. Wasserscheid: *Hydrogen Storage Technologies for Future Energy Systems*. Annual review of chemical and biomolecular engineering, 8:445–471, 2017.
- [94] R. Prieler, P. Bělohradský, B. Mayr, A. Rinner und C. Hochenauer: *Validation of Turbulence/Chemistry Interaction Models for Use in Oxygen Enhanced Combustion*. Energy Procedia, 120:548–555, 2017.
- [95] T. Sattelmayer: *Grundlagen der Verbrennung in stationären Gasturbinen*. In: C. Lechner und J. Seume (Hrsg.): *Stationäre Gasturbinen*, S. 397–452. Springer, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [96] R. Sauermost und D. Freudig: *Lexikon der Biologie*, 2017. <http://www.spektrum.de/lexikon/biologie/>, besucht: 16.11.2017, 14:24 Uhr.
- [97] V. Schröder: *Explosionsgrenzen von Wasserstoff und Wasserstoff-Methan-Gemischen*, Bd. 253 d. Reihe *Forschungsbericht/ Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)*, Berlin. Wirtschaftsverlag NW, Verlag für neue Wissenschaft GmbH, Bremerhaven, 2002.
- [98] H. Schütz, R. Lückerrath, T. Kretschmer, B. Noll und M. Aigner: *Analysis of the Pollutant Formation in the FLOX® Combustion*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 130(1), 2008.
- [99] S.R. Shabaniyan, M. Derudi, M. Rahimi, A. Frassoldati, A. Cuoci und T. Faravelli: *Experimental and Numerical Analysis of Syngas MILD Combustion*. XXXIV Meeting of the Italian Section of the Combustion Institute, 2011.
- [100] S.N. Sivanandam und S.N. Deepa: *Introduction to Genetic Algorithms*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2008.
- [101] M. Slack und A. Grillo: *Investigation of Hydrogen-Air Ignition Sensitized by Nitric Oxide and by Nitrogen Dioxide*. NASA, (NASA CR-2896), 1977.
- [102] M.D. Slack, R.O. Prasad, A. Bakker und F. Boysan: *Advances in Cyclone Modelling Using Unstructured Grids*. TransIChemE, 78(Part A):1098–1104, 2000.

- [103] G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, D. K. Hanson, S. Song, Gardiner Jr. , William C., V. V. Lissianski und Z. Qin: *Mechanismus GRI-MECH 3.0*. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, besucht: 19.02.2018, 16:12 Uhr.
- [104] N. C. Smythe und J. C. Gordon: *Ammonia Borane as a Hydrogen Carrier: Dehydrogenation and Regeneration*. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2010(4):509–521, 2010.
- [105] A. D. Snyder, D. L. Zanders, G. B. Skinner und J. Robertson: *Shock Tube Studies of Fuel-Air Ignition Characteristics*. Air Force Aero Propulsion Laboratory Research and Technology Division, (AFAPL-TR-65-93), 1965.
- [106] F. Sotoodeh und K. J. Smith: *Kinetics of Hydrogen Uptake and Release from Heteroaromatic Compounds for Hydrogen Storage*. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49:1018–1026, 2010.
- [107] F. Sotoodeh, L. Zhao und K. J. Smith: *Kinetics of H₂ Recovery from Dodecahydro-N-Ethylcarbazole over a Supported Pd Catalyst*. *Applied Catalysis A: General*, 362(1-2):155–162, 2009.
- [108] D. B. Spalding: *Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames*. *Symposium (International) on Combustion*, 13(1):649–657, 1971.
- [109] D. B. Spalding: *Development of the Eddy-Break-Up Model of Turbulent Combustion*. *Symposium (International) on Combustion*, 16(1):1657–1663, 1977.
- [110] J. Ströhle und T. Myhrvold: *Reduction of a Detailed Reaction Mechanism for Hydrogen Combustion Under Gas Turbine Conditions*. *Combustion and Flame*, 144(3):545–557, 2006.
- [111] N. Syred und J. M. Beér: *Combustion in Swirling Flows: A Review*. *Combustion and Flame*, 23(2):143–201, 1974.
- [112] D. Teichmann, K. Stark, K. Müller, G. Zöttl, P. Wasserscheid und W. Arlt: *Energy Storage in Residential and Commercial Buildings via Liquid Or-*

- ganic Hydrogen Carriers (LOHC)*. Energy & Environmental Science, 5(10):9044, 2012.
- [113] H. Tennekes und J. L. Lumley: *A First Course in Turbulence*. Massachusetts Institute of Technology Press, Cambridge, 1985.
- [114] L. Tepliczky: *Zur Berechnung von Wirbelkernhalbmessern in rotationssymmetrischen Drallströmungen*. Forschung im Ingenieurwesen, 36(3):74–78, 1970.
- [115] P. Therkelsen, J. Mauzey, V. McDonell und S. Samuelsen: *Evaluation of a Low Emission Gas Turbine Operated on Hydrogen*. Proceedings of ASME Turbo Expo, 2006.
- [116] K. M. Thomas: *Hydrogen Adsorption and Storage on Porous Materials*. Catalysis Today, 120(3-4):389–398, 2007.
- [117] E. Truckenbrodt: *Strömungsmechanik: Grundlagen und technische Anwendungen*. Springer, Berlin, Heidelberg, 1968.
- [118] H. Tsuji, A. K. Gupta, T. Hasegawa, M. Katsuki, K. Kishimoto und M. Morita: *High Temperature Air Combustion: From Energy Conservation to Pollution Reduction*. Environmental and energy engineering series. CRC Press, Boca Raton, 2003.
- [119] TURBEC S.p.A.: *On-Site Turbine Power: Microturbine T100 Unit*, 2005.
- [120] S. Turns: *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. Mc Graw Hill, Boston, 2. Aufl., 2000.
- [121] S. P. Verevkin, V. N. Emel'yanenko, A. Heintz, K. Stark und W. Arlt: *Liquid Organic Hydrogen Carriers: An Upcoming Alternative to Conventional Technologies*. Thermochemical Studies. Industrial & Engineering Chemistry Research, 51(37):12150–12153, 2012.
- [122] A. Villani, M. Derudi und R. Rota: *Mild Combustion of Pure Hydrogen and Hydrogen-Based Fuels*. 29th Meeting on Combustion, Italian Section of the Combustion Institute, 2006.

- [123] V. V. Voevodsky und R. I. Soloukhin: *On the Mechanism and Explosion Limits of Hydrogen-Oxygen Chain Self-Ignition in Shock Waves*. Symposium (International) on Combustion, 10(1):279–283, 1965.
- [124] J. Warnatz, R. W. Dibble und U. Maas: *Verbrennung: Physikalisch-chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*. Springer, Berlin, 3. Aufl., 2012.
- [125] K. Weicker: *Evolutionäre Algorithmen*. Springer Fachmedien, Wiesbaden, 3., überarbeitete und erweiterte Aufl., 2015.
- [126] C. K. Westbrook und F. L. Dryer: *Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames*. Combustion Science and Technology, 27(1-2):31–43, 2007.
- [127] A. Wiedemann: *Mehrkomponenten-Laser-Doppler-Anemometer-Messungen in einer drallbehafteten Rohr- und Brennkammerströmung*. Dissertation, Georg-August-Universität, Göttingen, 2001.
- [128] A. Wiedemann: *Gasturbinentypen - eine Übersicht*. In: C. Lechner und J. Seume (Hrsg.): *Stationäre Gasturbinen*, S. 1–10. Springer, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [129] J. Wüning: *Flammenlose Oxidation von Brennstoff mit hochvorgewärmter Luft*. Chem.-Ing.-Tech, 63(12):1243–1245, 1991.
- [130] J. Wüning: *Flameless Oxidation to Reduce Thermal NO-Formation*. Progress in Energy and Combustion Science, 23(1):81–94, 1997.
- [131] J. Wüning: *Handbuch der Brennertechnik für Industrieöfen*. Vulkan, 2. Aufl., 2011.
- [132] M. Yang, Y. Dong, S. Fei, H. Ke und H. Cheng: *A Comparative Study of Catalytic Dehydrogenation of Perhydro-N-Ethylcarbazole over Noble Metal Catalysts*. International Journal of Hydrogen Energy, 39(33):18976–18983, 2014.
- [133] M. Yang, C. Han, G. Ni, J. Wu und H. Cheng: *Temperature Controlled Three-Stage Catalytic Dehydrogenation and Cycle Performance of Perhydro-9-Ethylcarbazole*. 12th CHEC, 37(17):12839–12845, 2012.

- [134] J. Zanger, T. Monz und M. Aigner: *Experimental Investigation of the Influence of Combustor Cooling on the Characteristics of a FLOX®-Based Micro Gas Turbine Combustor*. In: E. Benini (Hrsg.): *Progress in Gas Turbine Performance*. InTech, 2013.
- [135] J. Zanger, T. Monz und M. Aigner: *Experimental Investigation of the Combustion Characteristics of a Double-Staged FLOX®-Based Combustor on an Atmospheric and a Micro Gas Turbine Test Rig*. Proceedings of ASME Turbo Expo, 2015.
- [136] Y. B. Zeldovich: *The Oxidation of Nitrogen in Combustion and Explosions*. Acta Physicochimica, 21(1):577–628, 1946.
- [137] M. Zenner, D. Teichmann, M. Di Pierro und J. Dungs: *Flüssige Wasserstoffträger als potenzieller PKW-Kraftstoff*. ATZ, 114(12):940–947, 2012.
- [138] V. P. Zhukov: *Verification, Validation, and Testing of Kinetic Mechanisms of Hydrogen Combustion in Fluid-Dynamic Computations*. ISRN Mechanical Engineering, 2012(5):1–11, 2012.
- [139] P. Zimmermann: *Anpassung einer Mikrogasturbine an einen indirekt beheizten Gasturbinenzyklus mit Pebble-Heatern*. Dissertation, Technische Universität München, München, 2010.
- [140] G. Leonard und J. Stegmaier: *Development of an Aeroderivative Gas Turbine Dry Low Emissions Combustion System*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 116(3):542, 1994.