

# Fluiddynamische Aspekte eines Flugstromreaktors

Christian Jordan, Anton Friedl und Michael Harasek  
Institut für Verfahrenstechnik,  
Brennstofftechnik und Umwelttechnik an der TU Wien

15. Dezember 2000

## Zusammenfassung

Aufgabe dieser Arbeit war es, eine technisch realisierte Rauchgas-Trockensorptionsanlage mit Hilfe der numerischen Strömungssimulation eingehend zu untersuchen. Schwerpunkt der Berechnungen waren das Verhalten der Strömung im Diffusor (Ablösungserscheinungen), die Simulation der partikelbeladenen Gasströmung und die Turbulenzmodellierung.

---

## 1 Allgemeines

Die numerische Strömungssimulation (Computational Fluid Dynamics, CFD) erlebt in Zeiten laufend steigender Rechnerleistungen einen schwunghaften Aufstieg als Ersatz und Ergänzung von oft teuren und aufwendigen Modellversuchen (beispielsweise im Windkanal), wie auch in [1] ausgeführt wird.

Neben Zeit- und Kostenersparnis in der Anlagenplanung ist es auch möglich, das Anlagenverhalten nach apparatebaulichen Veränderungen in verschiedenen Betriebszuständen vorherzusagen, und so eine Optimierung von Umbauten durchzuführen.

## 2 Hardware-Voraussetzungen

Die Simulationsrechnungen wurden auf zentralen Rechnern des ZID der TU Wien durchgeführt, wahlweise auf fe.zserv.tuwien.ac.at und cfd.zserv.tuwien.ac.at, beides Multiprozessor-Alpha-Systeme (Compaq, vormals DEC) mit entsprechender Hauptspeicherausstattung (etwa 1 GB RAM pro CPU).

Als Betriebssystem wird Tru64 Unix (vormals DEC Unix) verwendet. Die Systeme sind auch in der Lage, auf Basis von SMP (symmetric multiprocessing) Aufgaben auf mehrere CPUs aufzuteilen, um die Berechnungsgeschwindigkeit zu verkürzen.

## 3 Software

Für die hier vorliegende Arbeit wurde der kommerzielle Finite-Volumen-Solver FLUENT der Firma FLUENT Inc. verwendet, der die Grundgleichungen (Impulsbilanz, Massenbilanz, Energiebilanz) für jedes der einzelnen Kontrollvolumina im zwei- oder dreidimensionalen Gitter einzeln integriert und löst. Für diese Arbeit wurden nur stationäre Berechnungen durchgeführt, wobei die Programmversionen FLUENT 5.0.4 bis 5.3.18 zum Einsatz kamen.

Das rechnerische dreidimensionale Abbild der Anlage wurde mit dem ebenfalls von der Firma FLUENT Inc. vertriebenen "CFD-Preprocessor" namens GAMBIT (verwendete Versionen GAMBIT 1.04 bis 1.2), einem einfachen CAD-Programm kombiniert mit der Möglichkeit, die Rechengitter zu generieren, erstellt. Aufgrund der Komplexität der Anlage mußte weitgehend auf unstrukturierte, tetraedrische Gitter zurückgegriffen werden, die erhöhte Flexibilität mußte allerdings mit vergrößertem rechnerischen Aufwand "bezahlt" werden. Die Turbulenz wurde mittels eines modifizierten  $k$ - $\epsilon$ -Ansatzes (siehe auch [3] und [7]) modelliert, die Partikel wurden mit einem Euler-Lagrange-Ansatz simuliert.

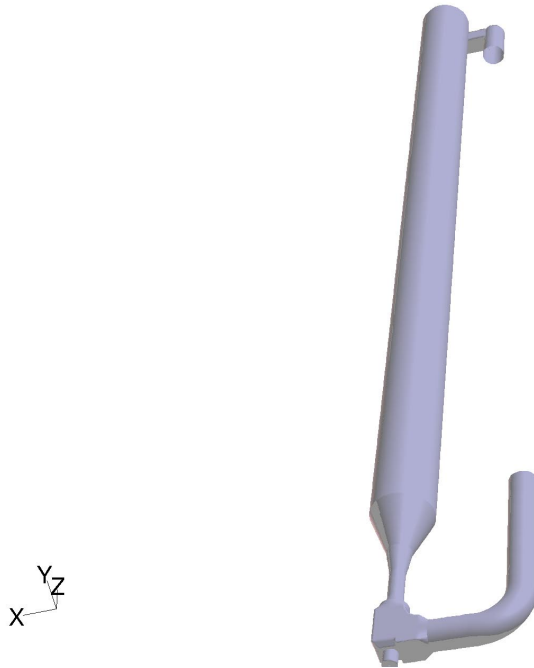


Abbildung 1: Gesamtansicht der modellierten Anlage

Die Modelle enthalten je nach verwendeter Gitterdichte etwa 180000-430000 Zellen und haben einen Hauptspeicherbedarf von ca. 200-900 MB. Die Rechenzeit beläuft sich auf 1 bis 4 Minuten pro Iteration, je nach aktivierten Modellen. Bis zur Konvergenz wurden zwischen 200-1000 Iterationen benötigt.

## 4 Anlagendaten

Zur Simulation wurde die damals in der Spittelau in Probetrieb geführte Pilotanlage (ein Trockensorptionsverfahren zur Rauchgasreinigung, Schwefeldioxid und Chlorwasserstoff werden absorbiert) herangezogen. Die Berechnung soll helfen, die Anlagensoptimierung zu erleichtern, beispielsweise Senkung des Druckverlustes, Vermeidung von Anbackungen, Optimierung der Wassereindüsung. Für einige dieser Aspekte können mittels Simulation Lösungsansätze geboten werden.

Mehrere Betriebszustände mit unterschiedlichen Gasvolumenströmen zwischen 2200-2900 Nm<sup>3</sup>/h und Temperaturen von 135-180°C wurden durchgerechnet, das Druckniveau des Austritts wurde auf den Umgebungsdruck gelegt.

Die Partikelsimulation wurde mit monodispersen Systemen verschiedener Durchmesser (20-300 μm) angesetzt. Die Leerrohrgeschwindigkeit im Reaktorrohr liegt im Mittel zwischen 2,4-3,4 m/s, die Maximalgeschwindigkeit im Diffusor liegt bei bis zu 70 m/s, was einem Reynoldszahlbereich von 100000-400000 entspricht, und daher deutlich im turbulenten Strömungsregime liegt. Die Rauchgasviskosität wird als temperaturunabhängig angenommen, die Gasdichte wird aus der idealen Gasgleichung ermittelt.

Der Reaktor wird mit konstanter Wandrauigkeit modelliert und als praktisch adiabatisch angenommen. Für sämtliche Simulationen wurde auch der Schwerkrafteinfluß berücksichtigt.

## 5 Abbild der Anlage

Wie bereits erwähnt, wurde der gesamte Reaktor (Einlaufrohr mit Krümmer, Windbox, Diffusor, Reaktorrohr, Austrittsumlenkung, Abströmrohr, Wassereindüsung-Lanze) für die Simulation modelliert, um

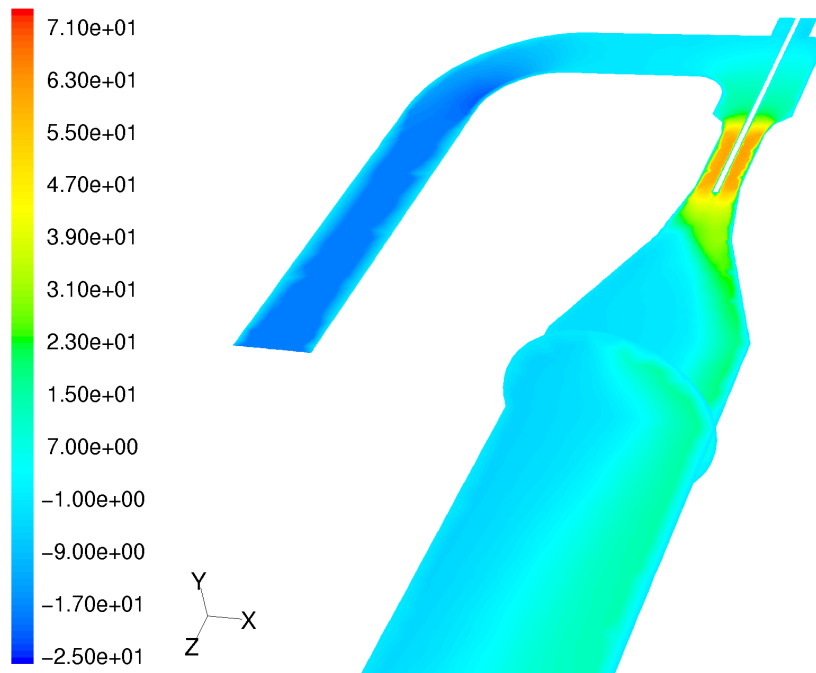


Abbildung 2: Wirkung der “Strömungskante” - vorher (z-Geschwindigkeit in m/s, Vollast)

einen möglichst umfassenden Blick auf die Strömungsverhältnisse im Reaktor zu gewinnen. Wie in Abbildung 1 dargestellt, ist FLUENT auch in der Lage, dreidimensionale Strukturen mittels Lichteffekten und Rendering auch wirkungsvoll darzustellen, was für eine gute Präsentation der Simulationsergebnisse zweckmäßig eingesetzt werden kann.

## 6 Einbauten zur Strömungsumlenkung

Bei der Rechnung hat sich herausgestellt, daß die Grenzschichtablösung der Strömung im Diffusor - und somit die Bildung der Rückström- und Jetbereiche (“Stalling”) - nicht vermieden werden kann (siehe auch [2], [5] und [6]). Der Einbau von Leitblechen und anderen Umlenkeinbauten in die “Windbox” (kastenförmiger 90°-Krümmer unterhalb des Diffusors, mit eingebauter Wassereindüslanze), welche nach herkömmlichen Methoden der Fluidodynamik ausgelegt wurden, führt nicht zum gewünschten Ergebnis. Vergleichmäßigung der Strömung kann auch durch die alternativ verwendeten “Strömungskanten” (kleine Einbauten an der Unterkante des Diffusoreintritts, welche die Strömungsgrenzschicht beeinflussen) auch nicht erreicht werden. Allerdings kann der Jet und der Rückströmbereich in eine für die Partikelverwirbelung günstigere Position gebracht werden, was in den Abbildungen 2 und 3 eindrucksvoll dargestellt wird. Der Druckverlust wird durch diese Einbauten nur geringfügig erhöht.

## 7 Diffusorgeometrie

Die einzige Möglichkeit, die Wirbelbereiche im Diffusor zu vermeiden, ist die Umgestaltung dieses Teiles. Es wurden daher Simulationen durchgeführt, in welchen der Öffnungswinkel des Diffusors verändert wurde. Der Ausgangszustand wird in Abbildung 4 dargestellt.

Weiters wurden mit einer vereinfachten Geometrie Untersuchungen vorgenommen, um Rechenzeit zu sparen. Resultierend konnte festgestellt werden, daß das Stalling nur in Diffusoren mit einem halben Öffnungswinkel von weniger als 4° vermieden werden kann. Bei einem halben Öffnungswinkel von 20°

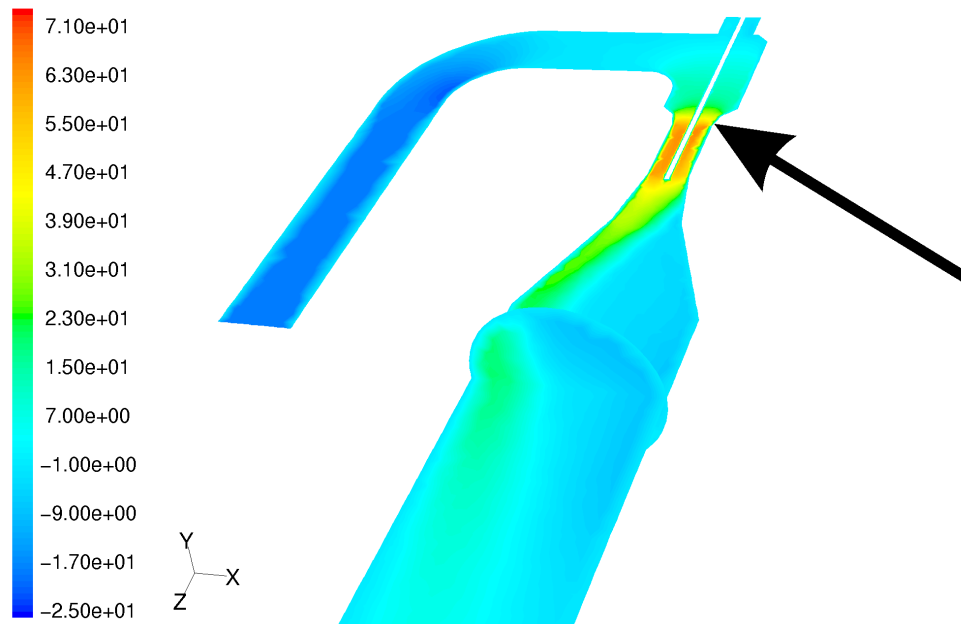


Abbildung 3: Wirkung der “Strömungskante” - nachher (z-Geschwindigkeit in m/s, Vollast)

tritt eine maximale Rückströmgeschwindigkeit von etwa 8 m/s auf, die auch bei größeren Winkeln nicht mehr übertroffen wird (siehe auch [5]).

Die Partikelauflage erfolgt allerdings einseitig, daher wird auch bei Verwendung eines  $3^\circ$ -Diffusors anstelle der real eingesetzten Bauart die Strömung durch die Partikel zusammengedrückt und es bildet sich wieder ein asymmetrischer Wirbel aus.

Der Druckverlust dieser Ausführung mit geändert Diffusorgeometrie ist allerdings dennoch um etwa 10% niedriger als bei der Originalgeometrie, und die Partikelkonzentration kann dennoch um etwa 10% gesteigert werden, was sich günstig auf die Effizienz des Reaktors auswirken dürfte.

## 8 Partikelsimulation

Um das Verhalten des Reaktors mit Partikelbeladung zu ermitteln, wurden Berechnungen mit Partikelinteraktion auf die Gasströmung gerechnet. Partikel mit verschiedenen Durchmessern wurden simuliert, um den Einfluß der Partikelgröße auf den Holdup und die örtliche Partikelkonzentrationsverteilung zu bestimmen. Eine derartige Partikelsimulation ist in Abbildung 5 exemplarisch dargestellt.

Es läßt sich feststellen, daß die Verweilzeit, welche sich zwischen 4-6 Sekunden bewegt, bei einem Partikeldurchmesser von  $40 \mu\text{m}$  minimal ist. Ab einem Durchmesser von  $300 \mu\text{m}$  ist unter Vernachlässigung der Porosität bei Agglomeratbildung (und damit sinkender Partikeldichte) kein Austrag der Partikel aus dem Reaktor mehr möglich. Ab einem Partikeldurchmesser von  $2000 \mu\text{m}$  fallen die Partikel sogar durch die Düse durch und sammeln sich in der Windbox.

Der Feststoff-Holdup im Reaktor kann nur näherungsweise berechnet werden, die reale Sorbensmenge im Reaktor ist deutlich höher, was auf modelltechnische Unzulänglichkeiten zurückzuführen ist - eine weitergehende Untersuchung ist zu empfehlen, insbesondere wäre ein Vergleich mit realen Meßwerten interessant, insbesondere auch im Hinblick auf den Konzentrationsverlauf über die Reaktorhöhe.

Gut sichtbar ist auch die Kern-Ring-Struktur [4] der Partikelkonzentration im Reaktor: Aufgrund der niedrigeren Gasgeschwindigkeit in Wandnähe haben die dort vorhandenen Teilchen eine höhere Verweilzeit, was in einer höheren Partikelkonzentration resultiert. Das Simulationsergebnis ist in Abbildung 6 dargestellt.

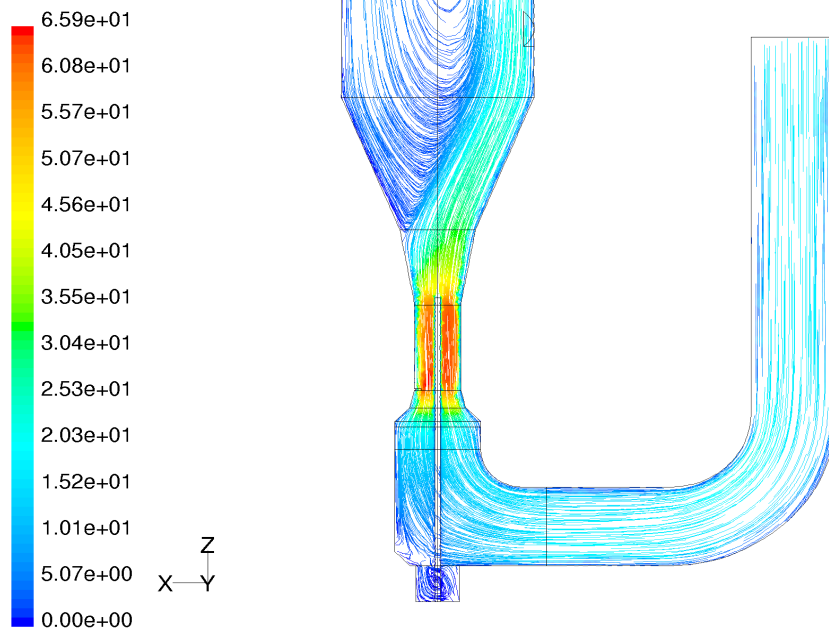


Abbildung 4: Rückströmbereich im Diffusor (Stromlinienbild, Absolutgeschwindigkeit in m/s), Vollastbetrieb

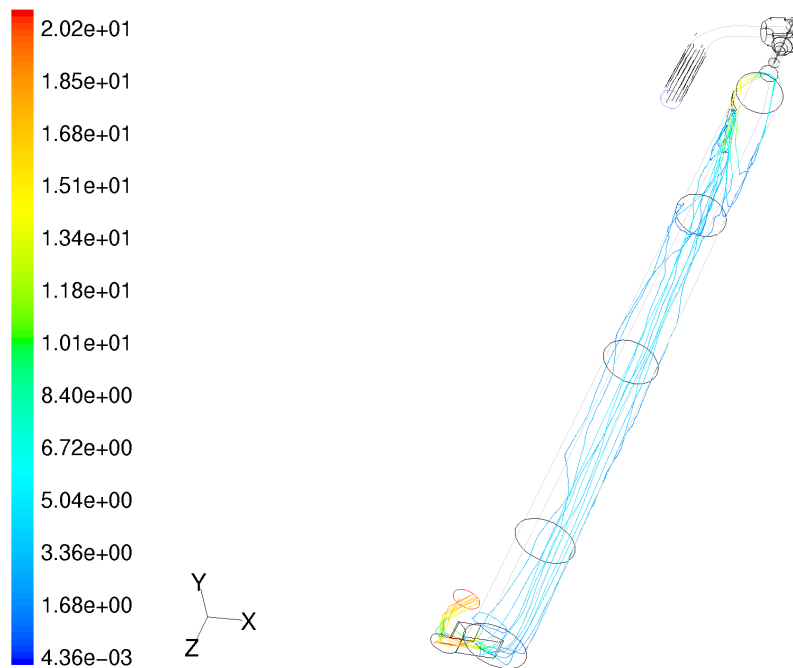


Abbildung 5: Beispiel für Partikelsimulation (Partikeltracks, Partikelgeschwindigkeit in m/s), Vollastbetrieb

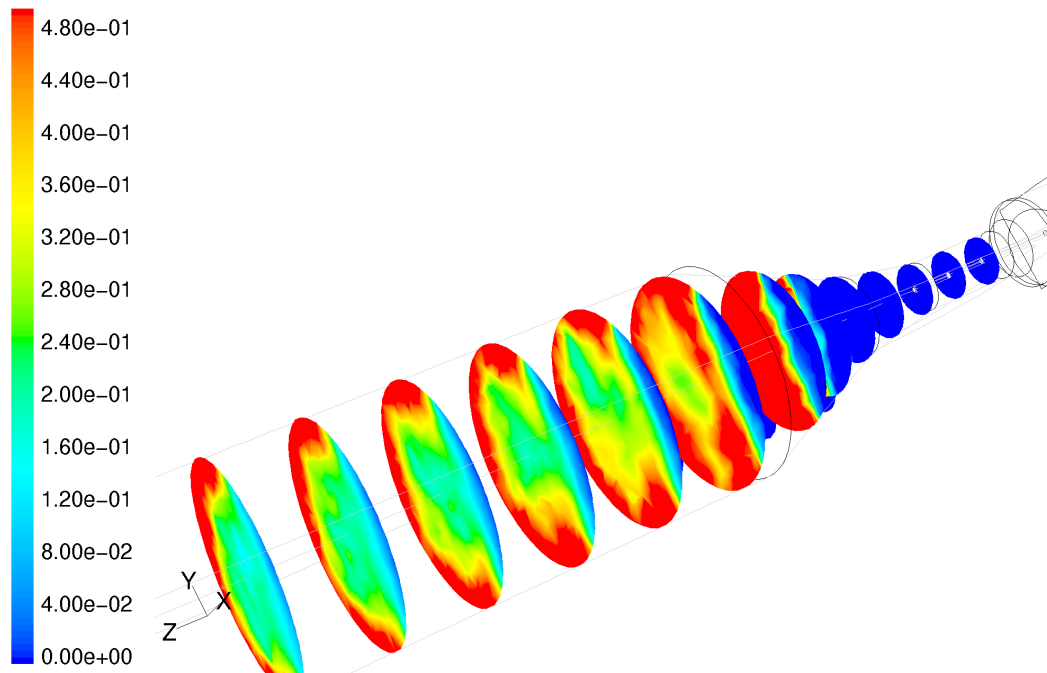


Abbildung 6: Kern-Ring-Struktur ( $2200 \text{ Nm}^3/\text{h}$ ,  $20 \mu\text{m}$ -Partikel,  $0,2 \text{ kg/s}$ ); Partikeldichte ( $\text{kg/m}^3$ )

## 9 Ausblick

Als weitere Optimierungsmöglichkeiten lassen sich noch folgende Punkte hervorheben, deren eingehende Behandlung zu empfehlen wäre:

- Austrittsgeometrie im Hinblick auf Druckabfall und Partikelholduperhöhung
- Verbesserung der Diffusorgeometrie (bessere Partikelverteilung)
- Auslegung einer Wassereindüsung
- Berechnung mit Aufgabe von polydispersen Systemen
- Implementierung der chemischen Reaktionen bzw. Sorptionskinetik

## Literatur

- [1] Birtigh, A.; Lauschke, G.; Schierholz, W. F.; Beck, D.; Maul, C.; Gilbert, N.; Wagner, H. G.; Werninger, C. Y.: CFD in der chemischen Verfahrenstechnik aus industrieller Sicht; Chemie Ingenieur Technik (72), S. 175-193, April 2000
- [2] Carlson, J. J.; Johnston, J. P.; Sagi, C. J.: Effects of Wall Shape on Flow Regimes and Performance in Straight, Two-Dimensional Diffusers; Journal of Basic Engineering Trans ASME, March 1967, p. 151ff
- [3] Durst, F.; Scheuerer, G.; Perić, M. usw.: Skriptum zum Kurzlehrgang NUMET 2000, Erlangen, März 2000
- [4] Bai, D.; Zhu, J.-X.; Jin, Y.; Yu, Z.: Internal recirculation flow structure in vertical upflow gas-solids suspensions. Part I: A core-Annulus-model; Powder Technology, 85 (1995), p. 171ff

- [5] Harasek, M.; Jordan, C.: Untersuchung der Strömungsablösung in dreidimensionalen runden Diffusoren mit Hilfe numerischer Strömungssimulation; Projektberichte ZID; Dezember 1999
- [6] Reneau, L. R.; Johnston, J. P.; Kline, S. J.: Performance and Design of Straight, Two-Dimensional Diffusers; Journal of Basic Engineering Trans ASME, March 1967, p. 141ff
- [7] Fluent 5 User's Guide, Fluent Inc. 1998; Bände 1-4