

Schlussbericht

zum Vorhaben

„Verbundvorhaben: Hocheffiziente Biogas-SCR-Systeme“ BiNOred

Themen:

Verbundvorhaben: Hocheffiziente Biogas-SCR-Systeme (BiNOred)

Teilvorhaben 1: Experimentelle Untersuchung der Eindüsung von Harnstoff-Wasser-Lösung für SCR-Systeme von Biogas-BHKW

Teilvorhaben 2: Entwicklung eines CFD-basierten Auslegungstools für die SCR - Abgasnachbehandlung in Biogas-BHKW

Teilvorhaben 3: Feldvalidierung und Begleitung der Entwicklung einer computergestützten Auslegung zur SCR Abgasnachbehandlung von Biogas-BHKW

Zuwendungsempfänger:

Teilvorhaben 1: Leibniz Universität Hannover

Teilvorhaben 2: Technische Universität Berlin

Teilvorhaben 3: Emission Partner GmbH & Co. KG

Förderkennzeichen:

Teilvorhaben 1: 2220NR120A

Teilvorhaben 2: 2220NR120B

Teilvorhaben 3: 2220NR120C

Laufzeit:

01.03.2022 bis 28.02.2025

Veröffentlichungsdatum:

15.04.2026

Gefördert durch:



**Bundesministerium
für Ernährung
und Landwirtschaft**

aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages mit Mitteln des Bundesministeriums für Ernährung und Landwirtschaft (BMEL) über die Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V. (FNR) als Projektträger des BMEL für das Förderprogramm Nachwachsende Rohstoffe unterstützt. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der Autorenschaft.

Inhaltsverzeichnis

I.	Kurzbericht.....	1
1.	Aufgabenstellung	1
2.	Planung und Ablauf des Vorhabens.....	1
3.	Resümee der wesentlichen Ergebnisse	1
a)	Arbeitspakete und Meilensteine	1
b)	Zusammenfassung.....	4
II.	Ausführliche Darstellung der Ergebnisse.....	6
1.	Erzielte Ergebnisse	6
	Arbeitspaket 1: Grundlagenuntersuchungen	6
	Arbeitspaket 2: Sprayuntersuchungen.....	18
	Arbeitspaket 3: Tropfenverdampfung.....	25
	Arbeitspaket 4: Wandinteraktion	32
	Arbeitspaket 5: Ammoniakverteilung	32
	Arbeitspaket 6: Anwendung „Digitales Abbild“	42
1.	Geometrie und Modellierung.....	48
2.	Randbedingungen	48
3.	Validierung mit experimentellen Daten	48
	Zur Validierung der Simulation wurden experimentelle Daten herangezogen. Die relevanten Messdaten wurden direkt vor dem Katalysator aufgenommen. Die folgenden Mittelwerte wurden dabei verglichen:.....	48
4.	Analyse der Ammoniakverteilung.....	48
2.	Verwertung.....	50
a)	Erfindungen/Schutzrechtsanmeldungen.....	50
b)	Wirtschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende.....	50
c)	Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten nach Projektende	50
d)	Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit	51
3.	Erkenntnisse von Dritten	51
4.	Veröffentlichungen	51
ANHANG	53
	Teilvorhaben 1:	53
1.	Ziel und Gegenstand des Teilvorhabens	53
2.	Bearbeitete Arbeitspakete	53
3.	Wesentliche Ergebnisse des Teilvorhabens.....	54
	Teilvorhaben 2: Mona	55
1.	Ziel und Gegenstand des Teilvorhabens	55
2.	Bearbeitete Arbeitspakete	55
3.	Wesentliche Ergebnisse des Teilvorhabens.....	56
	Teilvorhaben 3:	57
1.	Ziel und Gegenstand des Teilvorhabens	57
2.	Bearbeitete Arbeitspakete	57
	Arbeitspaket 1.2: Aufbau Prototypen und Grundgerüst „Digitales Abbild“	57
	Arbeitspaket 2.3: Simulation Sprayausbreitung.....	57

Arbeitspaket 3.1: Simulation Tropfenverdampfung.....	57
Arbeitspaket 5.1: Messung Ammoniakgleichverteilung.....	57
Arbeitspaket 6.1: Parametervariation zur Prüfung des „Digitalen Abbilds“	57
3. Wesentliche Ergebnisse des Teilvorhabens.....	57

I. Kurzbericht

1. Aufgabenstellung

Im Rahmen des BiNOred-Projektes geht es um eine Entwicklung für die Realisierung von sehr sauber arbeitenden SCR-Systemen (Selektive katalytische Reduktion), damit die ab 2023 nach der 44. BImSchV (Bundes-Immissions-Schutz-Verordnung) sehr strengen Emissionsregeln eingehalten werden können. Diese SCR-Systeme sind notwendig, um in Zukunft saubere und CO₂-neutrale Biomasse in Blockheizkraftwerken (BHKW) nutzen zu können. Dazu soll ein "Digitales Abbild" für die Eindüsung von Harnstofflösung in heißes Abgas entwickelt werden. Dabei liegt der Fokus auf der Parametrisierung der Einflüsse des komplexen Zusammenhangs aus geometrischen und physikalischen Randbedingungen, welche sich in maßgeblicher Weise von jenen im Automobil- und Kraftwerksbereich unterscheiden. Speziell wird hier die Verteilung der Harnstofflösung und anschließend des freigesetzten Ammoniaks betrachtet. Damit soll bei konkreten Anwendungen bereits in der Projektierungsphase vorhergesagt werden können, unter welchen Voraussetzungen der effizienteste Einsatz von Harnstofflösung möglich ist. Mit Hilfe des "Digitalen Abbilds" wird es dann möglich, Harnstofflösung für den Betrieb eines SCR-Katalysators zur Stickoxid-Reinigung des Abgases als Ressource bedarfsoptimiert einzusetzen und gleichzeitig den Ammoniakschlupf zu minimieren. Dies verhindert auch die daraus resultierenden Sekundäremissionen wie Stickoxide oder Blausäure. Dabei kann eine Überdimensionierung des SCR-Katalysatorvolumens vermieden werden, was aus wirtschaftlichen Gründen nötig ist. Hiermit kann der hocheffizienten, CO₂-neutralen Biomassenutzung eine reelle Chance eingeräumt werden, da sie einem immensen Kostendruck unterliegt. Die Ergebnisse finden direkt Verwertung im Biogas-BHKW-Markt, da durch das Inkrafttreten der 44. BImSchV ab 2023 strengere Emissionsregularien gelten, die nur mit einem optimal ausgelegten SCR-System einzuhalten sind.

2. Planung und Ablauf des Vorhabens

Das dreijährige Projekt wurde in sieben Arbeitspaketen strukturiert. Da eine genaue Beschreibung jedes einzelnen Prozessschritts aufgrund der Rückwirkung dieser untereinander von herausragender Bedeutung für eine akkurate Beschreibung des Gesamtsystems ist, musste das System, angefangen vom initialen Spraybild (AP 1.1), über die Abbildung der einzelnen Transportprozesse und deren Einflussfaktoren (AP 2-5), grundlegend untersucht werden. In einem finalen „Stress-Test“ (AP 6) wurde das entwickelte Gesamtmodell unter Berücksichtigung verschiedener anwendungsrelevanter Randbedingungen validiert und dessen Vorhersagequalität quantifiziert. Diese Arbeitspakete wurden von den drei Partnern so durchgeführt, dass die experimentellen Grundlagenuntersuchungen an der Leibniz Universität Hannover stattfanden, die Entwicklung des Digitalen Zwillings von der TU Berlin durchgeführt wurde und die Fa. Emission Partner den Bezug zur technologischen und wirtschaftlichen Anwendung an jeder Stelle des Projektes darstellte. Diese Zusammenarbeit kann als sehr gelungen bezeichnet werden. Das Vorhaben konnte im Wesentlichen entsprechend dieser Planung durchgeführt werden. Abgesehen von kleineren Projektmodifikationen, auf die später eingegangen wird, war dieser Ablauf erfolgreich für das Projektziel.

3. Resümee der wesentlichen Ergebnisse

a) Arbeitspakete und Meilensteine

Arbeitspakete (AP) (lt. Planung im Antrag)	Bearbeitungszeitraum (lt. Balkenplan im Antrag)	Zielerreichung
AP 1 Grundlagenuntersuchungen	03/2022 bis 11/2022	AP 1.1 Charakterisierung kommerzieller Düsen: Es wurden Spraywinkel, 2D-Geschwindigkeitsfelder in unmittelbarer Düsennähe sowie Tropfendurchmesser und -Geschwindigkeiten im weiteren Verlauf des Sprays für mehrere baugleiche Düsen unter verschiedenen Betriebsbedingungen vermessen. Es wurde eine erhebliche Streuung der Düsen hinsichtlich einiger Parameter festgestellt, die auf fertigungsbedingte Unterschiede in der Düsengeometrie zurückzuführen sind. AP 1.2 (a) Konstruktion der Prototypen: Es wurde ein Prototyp einer Mischstrecke (DN 300) mit optischen Zugängen auskonstruiert und gefertigt. AP 1.2 (b) Grundgerüst des digitalen Abbilds: Es wurde ein stabiles vorläufiges numerisches Gerüst entwickelt, dessen Genauigkeit während der Ausarbeitung der folgenden Arbeitspakete stetig untersucht und verbessert wurde.
AP 2 Sprayuntersuchungen	12/2022 bis 11/2023	AP 2.1 Messungen Spraywinkel und Charakterisierung Sprayaufbruch:

Arbeitspakete (AP) (lt. Planung im Antrag)	Bearbeitungszeitraum (lt. Balkenplan im Antrag)	Zielerreichung
		<p>Die Messung zur Charakterisierung des Sprayaufbruchs wurden im Rahmen von Shadowgraphy- und SIV-Messungen unter gefeuerten Betriebsbedingungen durchgeführt. Es zeigt sich, dass das Spray insbesondere bei Betriebsbedingungen mit hohen Gastemperaturen eine hohe Verdampfungsneigung und nach wenigen Zentimetern stromabwärts bereits einen hohen Dampfanteil aufweist. Aufgrund der dynamischen Veränderungen im Spraybild variiert der Spraywinkel sehr deutlich.</p> <p>AP 2.2 Messungen Tropfengrößenverteilung: Da das Spray aufgrund seiner feinen Zerstäubung einer schnellen Verdampfung unterliegt, wurde auf eine weitere aufwändige Messung der Tropfengrößen-verteilung verzichtet.</p> <p>AP 2.3 Simulation Sprayausbreitung: Es wurde mit den bekannten Tropfendurchmessern aus AP 1 eine gute Korrelation zwischen Simulationen und Experimenten erreicht. Die Messdaten auf den Validierungsebenen von 100 mm und 200 mm konnten numerisch wiedergegeben werden.</p> <p>AP 2.4 Designstudie: Eine numerische Optimierungsstudie des Düsenneigungswinkels zeigte im Vergleich zu der Düsenposition, die im experimentellen und numerischen Aufbau verwendet wird, keine signifikante Verbesserung.</p>
<p>AP 3 Tropfenverdampfung</p>	<p>09/2023 bis 02/2024</p>	<p>AP 3.1 Simulation Verdampfungslänge: Auf Basis von Messdaten und Korrelationen aus der Literatur wurde eine Zweistoffdatenbank erstellt. Sie enthält die Stoffeigenschaften von Wasser und Harnstoff als Reinstoffe, wobei mit Hilfe von Mischgesetzen Eigenschaften erarbeitet wurden, mit denen das Gemisch in Übereinstimmung mit Literaturdaten abgeglichen wurde. Die Verdampfungscharakteristik wurde aus Tropfen-Simulationen ermittelt und ebenfalls mit Literaturdaten ins Verhältnis gesetzt.</p> <p>Die Verdampfungslänge des Sprays wurde numerisch untersucht und mit verschiedenen Fällen aus den Experimenten in AP 3.2 verglichen. Dabei konnte in einigen Betriebspunkten die experimentell ermittelten Verdampfungslängen numerisch wiedergegeben werden.</p> <p>AP 3.2 Messung Verdampfungslänge: Die Verdampfungslänge wurde an der optisch zugänglichen Mischstrecke unter verschiedenen Betriebsparametern erfasst. Es zeigt sich, dass das Spray innerhalb der ersten 100 mm stromabwärts vollständig verdampft ist.</p>
<p>AP 4 Wandinteraktion</p>	<p>03/2024 bis 05/2024</p>	<p>AP 4.1 Charakterisierung Tropfen-Wand-Kontakt und Filmbildung: Die Tropfen-Wand-Interaktion war in der Projektplanung als zentral wichtiger Vorgang erwartet worden. Aufgrund der schnellen Verdampfung wurde sie allerdings nicht beobachtet.</p> <p>AP 4.2 Messung Spraydichte vor und hinter Mischer: Eine Messung der Spraydichte vor und hinter dem Mischer war nicht notwendig, da das Spray bereits weit vor dem Mischer verdampft ist.</p> <p>4.3 Simulation Wandinteraktion: Ziel des Arbeitspakets war die numerische Analyse der Wechselwirkungen zwischen Tropfen, Rohrwänden und dem Mischer im DN 300. Experimente und Simulationen zeigten, dass der Spraynebel der Harnstoff-Wasser-Lösung schnell verdampft, wodurch keine Wand-Tropfen-Wechselwirkung stattfindet. Die Einführung einer</p>

Arbeitspakete (AP) (lt. Planung im Antrag)	Bearbeitungszeitraum (lt. Balkenplan im Antrag)	Zielerreichung
		Metallplatte nahe der Düse machte jedoch eine Untersuchung des Einflusses auf den Spraynebel notwendig. Simulationen ergaben, dass die Tröpfchen die Platte nicht erreichten, weshalb die Analyse aufgrund fehlender Filmbildung nicht weiterverfolgt wurde.
AP 5 Ammoniakverteilung	06/2024 bis 11/2024	<p>AP 5.1 Messung Ammoniakgleichverteilung:</p> <p>Die Messungen zur Ammoniakgleichverteilung wurden mittels FTIR-Spektroskopie durchgeführt. Es zeigt sich das eine hohe Zerstäubungsluftmenge die Gleichverteilung erheblich begünstigt. Weiterhin kann ein Einfluss der Gasgeschwindigkeit auf die Gleichverteilung beobachtet werden. Der Einsatz eines Mischers erweist sich ebenfalls als sinnvoll, wobei der Effekt des Mischers in einigen Betriebspunkten nur schwach ausgeprägt ist.</p> <p>AP 5.2 Validierung von Fluidodynamik, Energie- und Stoffübertragung:</p> <p>Im Rahmen dieses APs wurde ein gut integrierter und stabiler numerischer Arbeitsablauf entwickelt, der Eindüsung, Verdampfung und chemische Reaktionen umfasst.</p> <p>Das entwickelte digitale Bild wird anhand der experimentellen Ergebnisse aus AP 5.1 validiert. Die Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung bei der Vorhersage von Temperatur und Ammoniakverteilung.</p> <p>Relevante Kalibrierungsparameter für die chemischen Reaktionen werden berechnet und zur Abstimmung des Stofftransportmodells als Teil des entwickelten digitalen Bildes verwendet. Der entwickelte numerische Ansatz wird mit einer guten Übereinstimmung mit den Experimenten und einer maximalen Abweichung von 8 Prozent validiert, was angesichts der Komplexität des Systems ein sehr guter Wert ist</p>
AP 6 Anwendung „Digitales Abbild“	09/2024 bis 02/2025	<p>AP 6.1 Parametervariation zur Prüfung des „digitalen Abbilds“(Stresstest):</p> <p>Simulation eines Prototypen-SCR-Reaktors mit dem entwickelten numerischen Ansatz. Die Ergebnisse zeigen gute Übereinstimmung für alle Prozessschritte auch bei erheblich geänderten Randbedingungen mit entsprechenden experimentellen Daten.</p> <p>AP 6.2 Simulation bestehender Anlagen:</p> <p>Der entwickelte numerische Ansatz für „Digitalen Abbilds“ wird anhand von Echtzeit-Anwendungsdaten weiter untersucht. Zusätzlich zum DN300-Fall werden zwei weitere Konfigurationen innerhalb des verfügbaren Projektzeitrahmens simuliert. Die Ergebnisse des numerischen Ansatzes sind mit den verfügbaren Echtzeitdaten vergleichbar. Kleine Abweichungen liegen im Rahmen der Messgenauigkeit.</p>

Meilensteine (M) (lt. Planung im Antrag)	Fälligkeit (lt. Balkenplan im Antrag)	Zielerreichung
M 1 Experimentelles und numerisches Setup fertig	11/2022	Es wurde eine Datengrundlage durch die Charakterisierung der Düsen geschaffen. Auf dieser Basis wurden erste Simulationen durchgeführt. Das experimentelle Setup (DN300 Mischstrecke) ist fertiggestellt und befindet sich in der Nutzung.
M 2 Erste Version des vollständigen mit experimentellen Daten	05/2024	Es wurde ein robuster numerischer Ansatz entwickelt, um die Zerstäubung und Verdampfung der Harnstoff-Wasser-Lösung zu simulieren. Die Robustheit des numerischen Ansatzes wurde durch die systematische Bewertung der einzelnen Mechanismen (Spray- und Düseneigenschaften,

Meilensteine (M) (lt. Planung im Antrag)	Fälligkeit (lt. Balkenplan im Antrag)	Zielerreichung
gefüllten „Digitalen Abbilds“ entwickelt		Verdampfung, chemische Reaktionen und Hydrodynamik) und ihrer Wechselwirkungen nachgewiesen.

b) Zusammenfassung

Im Rahmen des Vorhabens wurden detaillierte Untersuchungen der vollständigen Prozesskette von SCR-Systemen durchgeführt. Durch die Untersuchungen wird das Verständnis der Prozesse erweitert und der Einfluss sämtlicher Randbedingungen erörtert, um hieraus Maßnahmen zur Effizienzsteigerung der Systeme abzuleiten. Die gewonnene Datengrundlage wird dann zur Validierung eines „Digitalen Abbilds“ genutzt, welches dazu dient, für konkrete Anwendungen vorherzusagen, unter welchen Bedingungen ein effizienter Einsatz von Harnstoff und ein sauberer Betrieb der Anlage möglich ist.

Zur grundlegenden Charakterisierung von kommerziellen Zweistoffdüsen und zur Ermittlung von fertigungsbedingter Streuung wurden eine Reihe von zehn baugleichen Düsen vermessen. Die Vermessungen erfolgten hinsichtlich Spraywinkel, Spray- bzw. Tropfengeschwindigkeit und Tropfendurchmesser. Es zeigte sich, dass ein gewisser Einfluss fertigungsbedingter Streuung auf die Messgrößen vorliegt. Durch die nachgewiesenen Unregelmäßigkeiten hinsichtlich der Geometrie des Zerstäubungsluft-Ringspalts wurde insbesondere der Spraywinkel bzw. die Neigung des Sprays sowie die Verteilung von Geschwindigkeit und Tropfendurchmesser innerhalb des Sprays beeinflusst. Die absoluten Tropfengrößen und Geschwindigkeiten waren für die meisten Düsen gut vergleichbar.

Darüber hinaus wurden an der angefertigten Mischstrecke mit optischen Zugängen Untersuchungen hinsichtlich Sprayaufbruch und Verdampfungsverhalten durchgeführt. Es zeigte sich, dass dem Spray durch die Gasströmung bereits kurz nach Düsenaustritt eine starke Ablenkung aufgeprägt wird, wodurch eine Spraywinkelbestimmung nicht zielführend war. Weiterhin wurden sehr dynamische Vorgänge zwischen Eindüsung und Gasströmung beobachtet.

Aus den Messdaten zur Verdampfungslänge wurden für sämtliche untersuchte Betriebspunkte Spraykennlinien erzeugt und für die Entwicklung der Simulationsmodelle zugänglich gemacht. Für die bestimmten Verdampfungslängen selbst ergeben sich zunächst unerwartete Ergebnisse, da die Verdampfungslänge scheinbar mit steigender Gastemperatur zunimmt. Dieser Effekt konnte auf die bei höheren Temperaturen verringerte Gasdichte zurückzuführen, welche sich aus dem Konstant halten der Gasgeschwindigkeit ergibt.

Weiterhin wurden zur Messung der Ammoniakverteilung vor dem Katalysator FTIR Messungen durchgeführt. Es zeigte sich ein erheblicher Einfluss auf die Gleichverteilung durch die Zerstäubungsluftmenge und die Gasgeschwindigkeit. So wird die Gleichverteilung einerseits durch einen hohen Eindüsimpuls und andererseits durch eine lange Verweilzeit in der Abgasstrecke begünstigt. Weiterhin zeigt sich, dass die absolute gemessene Ammoniakmenge mit geringerer Abgastemperatur stark abnimmt, was auf eine zunehmend unvollständige Harnstoffumsetzung hindeutet.

Es wurde ein effizienter Ansatz zur Modellierung des Eindüsvorgangs der Harnstoff-Wasser-Lösung (als Teil von AP 1.2 und AP 2.3) entwickelt, wobei der Schwerpunkt auf der Verteilung der Tröpfchen und dem Spraywinkel lag. Angesichts der Auswirkungen der Abgasquerströmung und der schnellen Verdampfung hat sich die Modellierung des Zweiflüssigkeits-Sprays als eine einzige (nur flüssige) Phase unter Einbeziehung der Trägheitseffekte der Luft als angemessen erwiesen.

Es wurde eine Designstudie durchgeführt, dessen Ziel es war, die am besten geeignete Düsenneigung zu untersuchen, die zu einer homogeneren Tröpfchengrößenverteilung und folglich zu einer besseren Durchmischung zwischen dem Spray und dem Abgasquerstrom führt. Es zeigte sich, dass eine negative Neigung nicht zielführend für eine gute Tröpfchenverteilung ist. Eine positive Neigung der Düse, führte zu einer relativ geringen Verbesserung von 4 %. Aufgrund des geringen Einflusses der Düsenneigung wurde diese für die weiteren Untersuchungen vernachlässigt.

Die Simulationsergebnisse zur Verdampfungslänge zeigen eine deutliche Temperaturabhängigkeit. Bei 500 °C verdampft das Spray schnell, wobei die Verdampfungslänge auf unter 100 mm sinkt - was den experimentellen Beobachtungen sehr nahe kommt. Im Gegensatz dazu erstreckt sich die Verdampfungslänge bei 400 °C und 450 °C auf etwa 300 mm, was auf einen langsameren Verdampfungsprozess aufgrund geringerer thermischer Energie und niedrigerer Tröpfchenfragmentierungsraten zurückzuführen ist.

In der Simulation wurde eine asymmetrische Verteilung von NH₃ beobachtet. Der obere Rohrbereich weist eine höhere NH₃-Konzentrationen auf als der untere Bereich, wobei die simulierte NH₃-Verteilung eine ausreichende Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zeigt. Dennoch müssen die folgenden Fehler berücksichtigt werden: Der Massenanteil von Ammoniak zeigt eine Abweichung von 4,6 bis 11,2 %, während der Gleichverteilungsindex eine Abweichung von 1,5 bis 8,4 % aufweist. Dennoch kann die Simulation auch im Hinblick auf den Harnstoffabbau als validiert angesehen werden. Das erste Forschungsziel wurde somit erreicht.

Es wurden zudem mehrere bestehende Anlagen mit dem entwickelten numerischen Ansatz simuliert. Es wurden gute Übereinstimmungen mit den Messdaten insbesondere bei der Temperaturverteilung erreicht. Die Abweichungen bei der NO_x-Konzentration sind angesichts der Komplexität des Systems und der Messunsicherheiten als akzeptabel zu bewerten. Die Fallstudien bestätigen somit die Praxistauglichkeit des Ansatzes zur numerischen Vorhersage industrieller Anlagen.

II. Ausführliche Darstellung der Ergebnisse

1. Erzielte Ergebnisse

Arbeitspaket 1: Grundlagenuntersuchungen

Arbeitspaket 1.1: Charakterisierung kommerzieller Düsen (LUH)

Innerhalb des AP 1.1 sollten typische Seriidüsen hinsichtlich Spraywinkel, Spraygeschwindigkeit und Tropfenspektren an der LUH vermessen werden. Dadurch sollte einerseits eine erste Charakterisierung des Spraybilds erfolgen und andererseits der Einfluss einer fertigungsbedingten Streuung der Düsen untersucht werden, um diesen im späteren Digitalen Abbild berücksichtigen zu können. Weiterhin dienen diese Daten als grundlegende Eingangsrandbedingungen für die Simulationen der TUB.

Im Rahmen des Arbeitspakets wurden mehrere baugleiche Zweistoffdüsen der Firma Albonair vermessen, welche von EP zur Verfügung gestellt wurden. Dabei wurden die Düsen in unterschiedlichen Betriebspunkten untersucht, wobei der Zerstäubungsluftvolumenstrom und der Flüssigkeitsmassenstrom variiert wurde. Da diese Untersuchungen unter atmosphärischen Bedingungen durchgeführt wurden, konnte keine Harnstofflösung verwendet werden, da diese auskristallisieren würde. Es wurde demineralisiertes Wasser genutzt. Da sich Harnstofflösung und Wasser in ihren physikalischen Eigenschaften stark ähneln, werden die Auswirkungen auf das Spraybild und insbesondere auf die fertigungsbedingten Streuungen der Düsen als gering eingeschätzt. Die gewählten Betriebspunkte sind in **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** zu finden. Der maximale Wassermassenstrom orientiert sich dabei an dem Harnstoff Durchsatz, wie er bei einer DN300 Abgasstrecke bei maximaler Leistung (500 kW) benötigt würde. Die gewählten Luftvolumenströme erstrecken sich über den gesamten Betriebsbereich der Düse.

Tabelle 1: Betriebspunktmatrix

		Luftvolumenstrom in L/min			
		8	10	15	20
Wassermassenstrom in kg/h	0,5	OP1	OP2	OP3	
	1,0	OP4	OP5	OP6	OP7
	1,5		OP8	OP9	OP10

Zur Untersuchung der Parameter Spraywinkel, Spraygeschwindigkeit und Tropfenspektren erfolgte die Vermessung der Düsen in drei unterschiedlichen Abschnitten:

- Spraywinkelmessungen mittels Schattenwurftechnik
- Zwei-dimensionale Spraygeschwindigkeitsmessungen (düsenah) mittels Structural Image Velocimetry (SIV)
- Tropfendurchmesser und -geschwindigkeitsmessungen (düsenfern) mittels Phasen Doppler Anemometrie (PDA)

Spraywinkel

Die Messdaten der Spraywinkel wurden über die Schattenwurfmesstechnik in unmittelbarer Düsennähe gewonnen. Es wurden insgesamt zehn Düsen vermessen. Ein schematischer Aufbau der Messtechnik inklusive eines resultierenden Spraybilds ist in **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** gezeigt. Dabei dient eine Hochleistungs-LED als Lichtquelle. Weiterhin kommt eine Hochgeschwindigkeitskamera inklusive Fernfeldmikroskop zum Einsatz. Die Optik ist so eingestellt, dass sich eine hohe Vergrößerung des betrachteten Bereichs in Kombination mit einem kleinen Tiefenschärfebereich ergibt. Auf diese Weise soll das Spray in dünnen Ebenen betrachtet werden können.

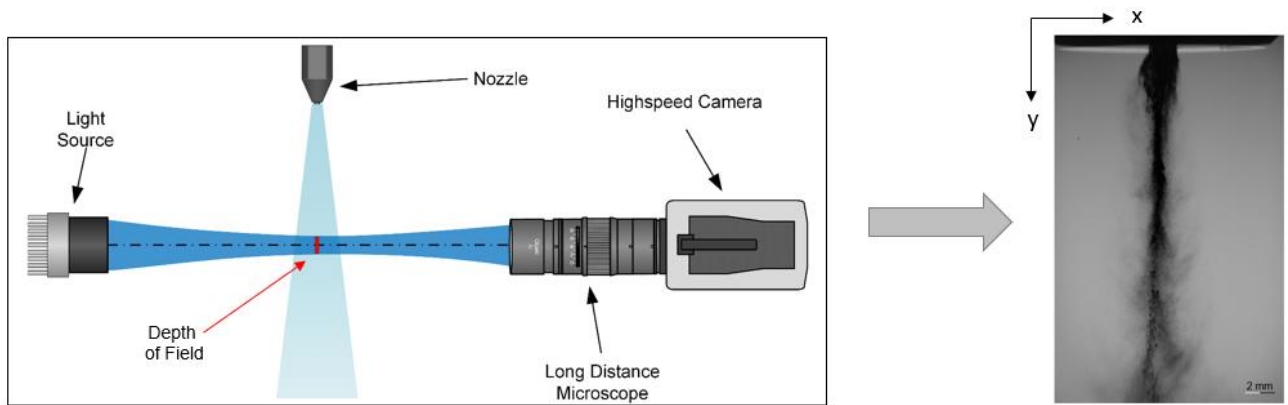


Abbildung 1: Schematischer Aufbau Schattenwurfmesstechnik

Mit den gewählten Einstellungen ergibt sich ein Sichtbereich von 13 mm in x-Richtung und 21 mm in y-Richtung. Bei einer Auflösung von 1280 x 800 Pixeln entspricht dies rund 16 μm pro Pixel. Um die Bewegungsunschärfe der möglichst gering zu halten wurde eine Belichtungszeit von 200 ns verwendet. Pro Düse und pro untersuchtem Betriebspunkt wurden jeweils 1000 Einzelbilder aufgenommen. Aus den Einzelbildern wurde mithilfe eines MATLAB Skripts der Spraywinkel gebildet. Dies geschah über zwei verschiedene Methoden:

- Binarisierung des Mittelwertbilds und anschließender Kantendetektierung
- Detektion des horizontalen, maximalen Intensitätsgradienten im Standardabweichungsbild und fitten einer Gerade durch die detektierten Maxima

In Abbildung 2 ist das Resultat beider Methoden beispielhaft dargestellt. Beim binarisierten Mittelwertbild (b) ergibt sich ein breiterer Spraywinkel gegenüber der Methode über die maximalen Gradienten im Standardabweichungsbild (c). Während über die Binarisierung fast jeder Tropfen eines jeden Einzelbilds als Information im resultierenden Mittelwertbild (a) noch erfasst wird, wird über die Maximale-Gradienten-Methode (heller Bereich – hohe Standardabweichung) quasi der aktivste Bereich im Spray definiert. Legt man beide ermittelten Winkel auf ein Rohbild (d) des gleichen Betriebspunkt ergeben beide Methoden eine leicht voneinander abweichende Aussage. Während der Winkel aus der Gradientenmethode die Kernströmung erfasst, die sich vor allem bei hohen Luftvolumenströmen ausbildet, umspannt der Winkel aus dem binarisierten Mittelwertbild das gesamte Spray inklusive einer „einhüllenden“ Strömung feinsten Tropfen um die Kernströmung. Eine Unterscheidung in Kernströmung und einhüllende Strömung ist insofern sinnvoll, da die Flüssigmasse über den Sprayquerschnitt stark ungleich verteilt ist. Über die Kernströmung wird dem Prozess der Großteil der Flüssigmasse zugeführt, während in der Einhüllenden demnach nur ein relativ kleiner Teil der Flüssigmasse enthalten ist. Es ist daher wichtig, je nach Betriebspunkt ggf. zwei unterschiedliche Spraywinkel zu verwenden, da die Flüssigmasse bei den Simulationen innerhalb des Spraywinkels als homogen verteilt angenommen wird.

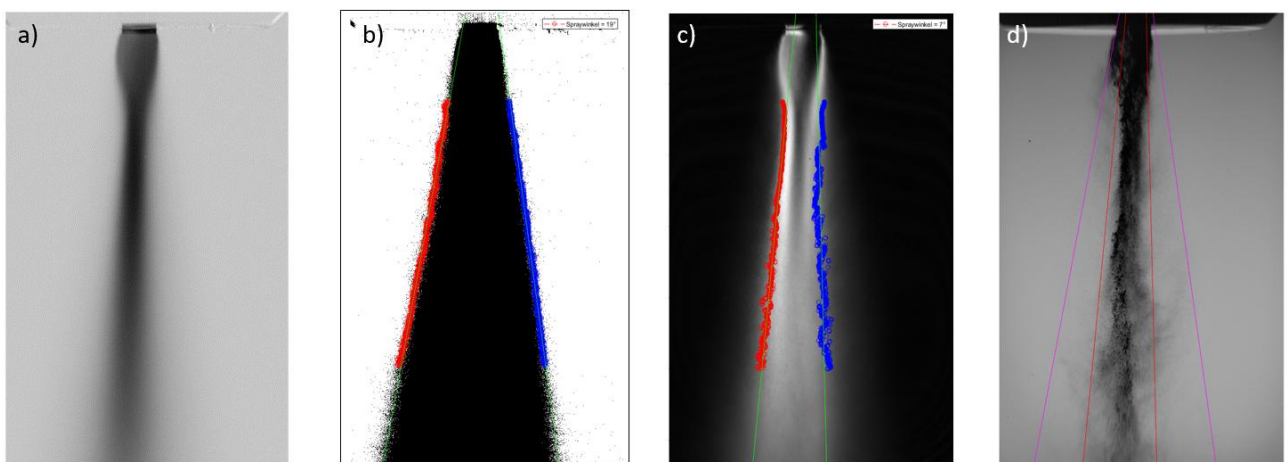


Abbildung 2: a) Mittelwertbild, b) binarisiertes Mittelwertbild, c) Standardabweichungsbild mit detektierten maximalen Gradienten, d) Rohbild mit Winkeln aus beiden Methoden

Die Detektion einer Kernströmung, wie sie in Abbildung 2 gezeigt ist, ist jedoch nicht in allen Betriebspunkten möglich. Erst ab einem Luftvolumenstrom von 15 L/min lässt sich eine zuverlässige Unterscheidung von Kernströmung und einhüllender Strömung durchführen. Bei geringeren Luftvolumenströmen ist die Tropfendichte über den Sprayquerschnitt deutlich homogener, weshalb sich weder per Algorithmus noch per manueller Betrachtung eine eindeutige Kernströmung erkennen lässt.

Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden. zeigt dazu die Spraywinkel für beide Methoden und alle Düsen bei einem Wassermassenstrom von 1,5 kg/h und einen Luftvolumenstrom von 10 bzw. 20 L/min. Hier wird der zuvor beschriebene Sachverhalt noch einmal deutlich. Für einen Luftvolumenstrom von 10 L/min nähern sich die Winkel aus beiden Methoden an. Es lässt sich also keine Kernströmung identifizieren.

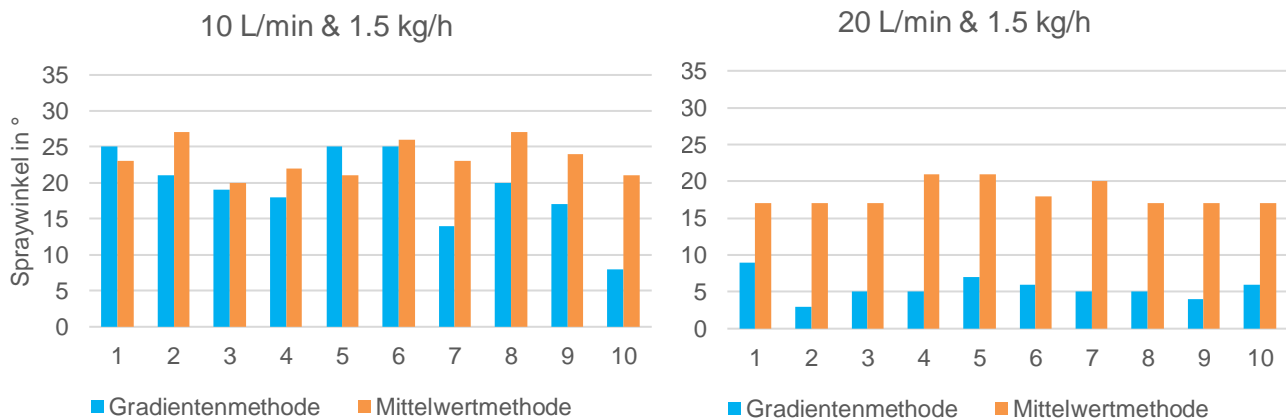


Abbildung 3: Vergleich der Spraywinkel beider Methoden in unterschiedlichen Betriebspunkten für alle Düsen

Wie bei Düse 10 zu erkennen gibt es jedoch hin und wieder Ausreißer die den Anschein erwecken, dass einige Düsen hingegen bei geringen Zerstäubungsluftströmen dennoch eine Kernströmung ausbilden. Bei manueller Betrachtung der Rohbilder lässt sich das Ergebnis aus dem Algorithmus jedoch nicht bestätigen. Dies ist auf eine gewisse Störanfälligkeit der Gradientenmethode zurückzuführen. Aufgrund dessen wurde bei der Auswertung ein erhöhter Wert auf die Überprüfung entsprechender Spraywinkel gelegt. Bei der Analyse der Spraywinkel für 20 L/min Luftvolumenstrom ergibt sich hingegen eine klare Trennung von Kernströmung und einhüllender Strömung.

Weiterhin lässt sich aus **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** eine gewisse Streuung der Spraywinkel entnehmen. Bei einem Luftvolumenstrom von 10 L/min bewegen sich die Spraywinkel (Mittelwertbildmethode) zwischen 20° und 27°. Bei 20 L/min bewegt sich der Winkel der Einhüllenden zwischen 17° und 21° während die Kernströmung einen Winkel zwischen 3° und 9° einnimmt. Die gezeigten Daten geben die allgemeinen Trends gut wieder:

- Abnehmender Spraywinkel bei Vergrößerung des Luftvolumenstroms
- Leichte Vergrößerung des Spraywinkels bei Vergrößerung des Wassermassenstroms
- Deutliche Reduzierung der Streuung bei Vergrößerung des Luftvolumenstrom oder Wassermassenstroms.

Zur Verdeutlichung der genannten Trends zeigt Abbildung 4 die über alle Düsen gemittelten Spraywinkel (über Mittelwertmethode) inklusive der dazugehörigen Standardabweichung für alle Betriebspunkte. Es zeigt sich zu dem, dass die Standardabweichung als Indikator für die Streuung der Düsen hinsichtlich des Spraywinkels starke Abhängigkeiten mit dem Betriebspunkt aufweist. Besonders hohe Standardabweichungen ergeben sich bei einer Kombination aus geringem Wassermassenstrom und Luftvolumenstrom. Es lässt sich zudem erkennen, dass sowohl eine Erhöhung des Wassermassenstroms als auch des Luftvolumenstroms tendenziell für eine Verringerung der Standardabweichung sorgt.

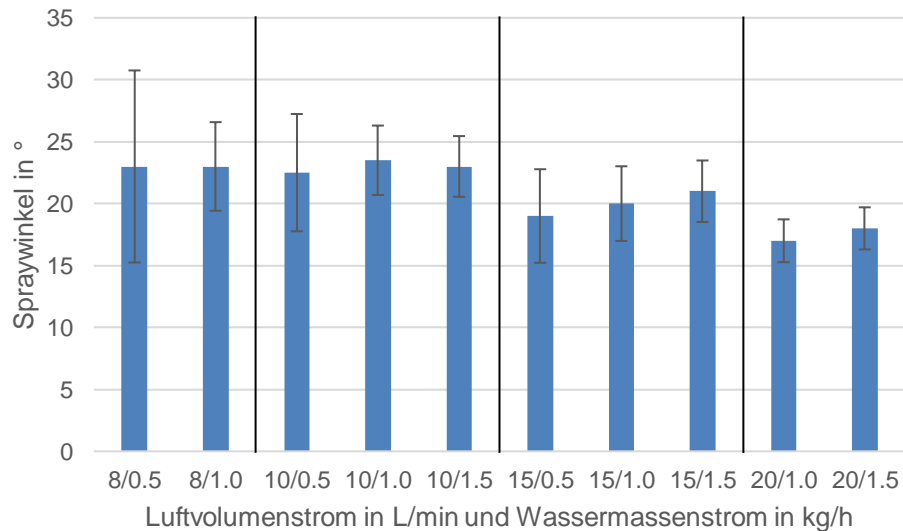


Abbildung 4: Mittlerer Spraywinkel mit Standardabweichung über sämtliche Betriebspunkte

Insbesondere bei geringen Durchsätzen weisen die Spraywinkel starke Streuung auf. So werden bspw. bei 8 L Luft/min und 0,5 kg Wasser/h Werte zwischen 16° und 38° vermessen. Da Unregelmäßigkeiten hinsichtlich der Medienversorgung der Düsen als Ursache für die Streuungen ausgeschlossen werden konnten, wurden unter Verdacht auf Fertigungsungenauigkeiten die Düsenöffnungen mikroskopisch untersucht. Exemplarisch sind als Abbildung 5 einige Bilder von Düsenöffnungen aufgeführt.

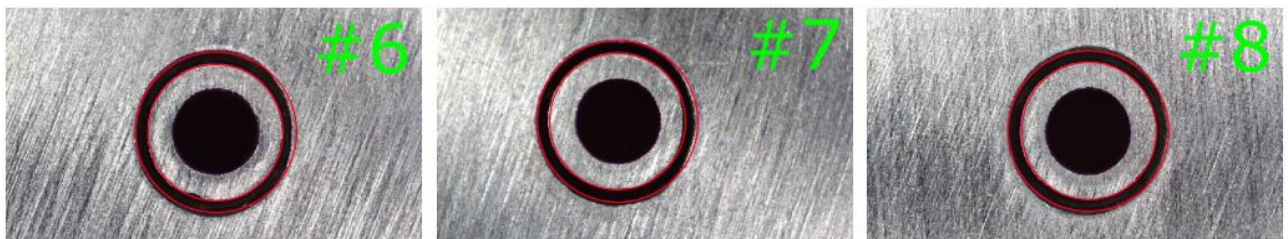


Abbildung 5: Auswahl von Aufnahmen der Düsenöffnung

Unter genauer Betrachtung der Düsenöffnungen fällt auf, dass die Ringspalte für die Zerstäubungsluft teils deutlich von einem geometrisch idealen Ringspalt (rote Ringe) abweichen. Insbesondere gilt dies für den Außendurchmesser des Ringspalts. Typisch ist allen voran eine erhöhte Breite des Ringspalts an der linken unteren Seite, wobei dieses Merkmal für die verschiedenen Düsen unterschiedlich stark ausgeprägt ist. Außerdem ist für einige Düsen an der oberen Seite ein verbreiteter (bspw. Düse 8) und an der linken Seite ein schmaler (bspw. Düse 6) Ringspalt zu erkennen. Zwar beträgt die Ringspaltbreite nur 0,1 mm, weshalb sich die absoluten Abweichungen vom Ideal im Maximum im mittleren Mikrometerbereich befinden. Jedoch bewegen sich die lokalen relativen Abweichungen teils bei +/- 30 %. Es wird vermutet, dass dies einen signifikanten Einfluss auf die Ausbildung der Zerstäubungsluftströmung und damit auch auf den Spraywinkel hat.

Die ungleich geformten Düsenöffnungen sind zudem vermutlich für weitere individuelle Phänomene bei der Spraybildung verantwortlich. So wurden bei identischen Betriebsbedingungen beispielsweise stark ungleiche Verteilungen der Standardabweichungen (vgl. Abbildung 6 Düse 8) für einige Düsen beobachtet. Bei genauerer Betrachtung der Rohbilder wurde erkannt, dass in diesen Fällen über die Seite mit der hohen Standardabweichung (hier rechte Sprayseite) ein Großteil der Flüssigmasse in Form von großen Tropfen und Ligamenten transportiert wird. Über die gegenüberliegende Seite werden hingegen nur wenig Masse und bereits sehr feine Tropfen transportiert. Zudem existieren Phänomene in denen das Spray für einige Düsen zu einer Seite geneigt ist. Düse 11 in Abbildung 6 zeigt dazu beispielhaft eine Neigung nach links.

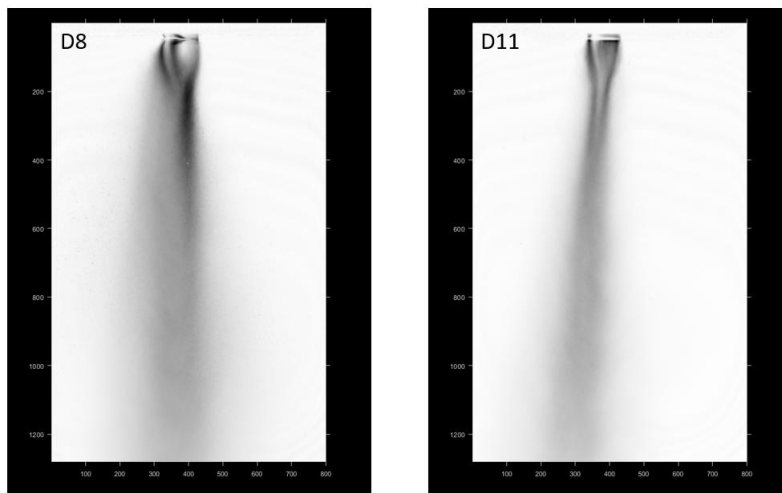


Abbildung 6: Invertierte Standardabweichung exemplarischer Sprayphänomene (15 L Luft/min und 1,0 kg Wasser/h)

Im weiteren Verlauf des Projekts ist es geplant, sowohl „symmetrische“ als auch „unsymmetrische“ Düsen zu verwenden, um insbesondere den Einfluss des jeweiligen Charakteristikums auf die Folgeprozesse wie Verdampfung und Ammoniakverteilung herauszuarbeiten. Für die Validierung der ersten Simulationen hinsichtlich der Spraybildung werden jedoch ganz bewusst Daten von symmetrischen Düsen verwendet.

Spraygeschwindigkeiten

Da die Tropfengeschwindigkeitsmessungen mittels PDA in ihrem minimalen Abstand zur Düsenöffnung limitiert sind, wurden zur Kompensation dessen im Düsennahbereich zusätzlich Geschwindigkeitsmessungen mittels der Structural-Image-Velocity (SIV)-Methode [1] durchgeführt. Für die SIV wird ein identischer Versuchsaufbau wie bei den Schattenwurfmessungen verwendet, mit dem Unterschied, dass statt Einzelbildern nun Doppelbilder mit einem Bildabstand von 2 μs aufgenommen werden. Aufgrund des gleichbleibenden Versuchsaufbaus bleibt auch der Sichtbereich (13 x 21 mm) gleich. Ein Algorithmus verfolgt Strukturen oder Partikel von einem Bild zum nächsten und kann aufgrund der in 2 μs zurückgelegten Wegstrecke die Geschwindigkeiten dieser Strukturen berechnen. Die Geschwindigkeiten werden dann in einem zweidimensionalen Geschwindigkeitsfeld dargestellt. In Abbildung 7 ist das Prozedere anhand von früheren Untersuchungen zu Dieselsprays veranschaulicht. Für die SIV Messungen wurden die gleichen Rahmenbedingungen wie für die Spraywinkelmessungen verwendet (siehe **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.**) und für insgesamt 10 Düsen vermessen.

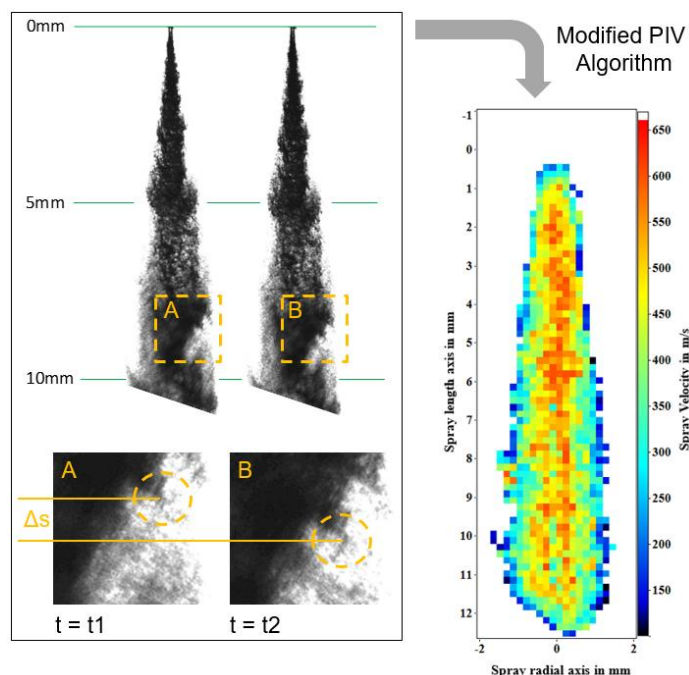


Abbildung 7: Prinzipielle Auswertung der Doppelbilder durch den SIV Algorithmus am Beispiel eines Dieselsprays [2]

Beispielhaft für die SIV Messungen sind unter Abbildung 8 die Geschwindigkeitsfelder sowie die Längs- und Radialprofile (15 mm Düsenabstand) für vier verschiedene Düsen in einem bei 15 L Luft/min und 1 kg Wasser/h dargestellt. Der qualitative Geschwindigkeitsverlauf entspricht dem zu erwarteten Verhalten, wobei die höchsten Geschwindigkeiten im Zentrum des Sprays erreicht werden. Da die Flüssigkeit drucklos aus der

Düse austritt und Tropfen erst durch die Zerstäubungsluft beschleunigt werden müssen, sind die Geschwindigkeiten innerhalb der ersten Millimeter nach Düsenaustritt relativ gering. In einem Abstand zwischen 8 mm und 10 mm wird die dann maximale Geschwindigkeit erreicht. Generell gilt eine gute Übereinstimmung bzgl. der erreichten Geschwindigkeitswerte. Die radialen Geschwindigkeitsverläufe zeigen eine sehr gute Deckung, wobei die maximal erreichten Geschwindigkeiten für alle Düsen zwischen 170 und 190 m/s liegen. An dieser Stelle sei aber ergänzt, dass die radialen Geschwindigkeitsprofile anhand der radialen Position ihrer maximalen Geschwindigkeit zentriert wurden, um den optischen Einfluss von links- oder rechtsseitig schießenden Düsen (bspw. Düse 11) zu kompensieren. Dieser Einfluss lässt sich für die Profile in Spray-Längsrichtung nicht kompensieren, da hier die Geschwindigkeiten nur in einer vertikalen Linie erfasst werden konnten. Nichtsdestotrotz zeigen die Längsprofile innerhalb der ersten 8 bis 10 mm eine gute Übereinstimmung. Im nachfolgenden Bereich sind leichte Unterschiede erkennbar, die sich jedoch auf einem ähnlichen Niveau wie in den radialen Profilen bewegen.

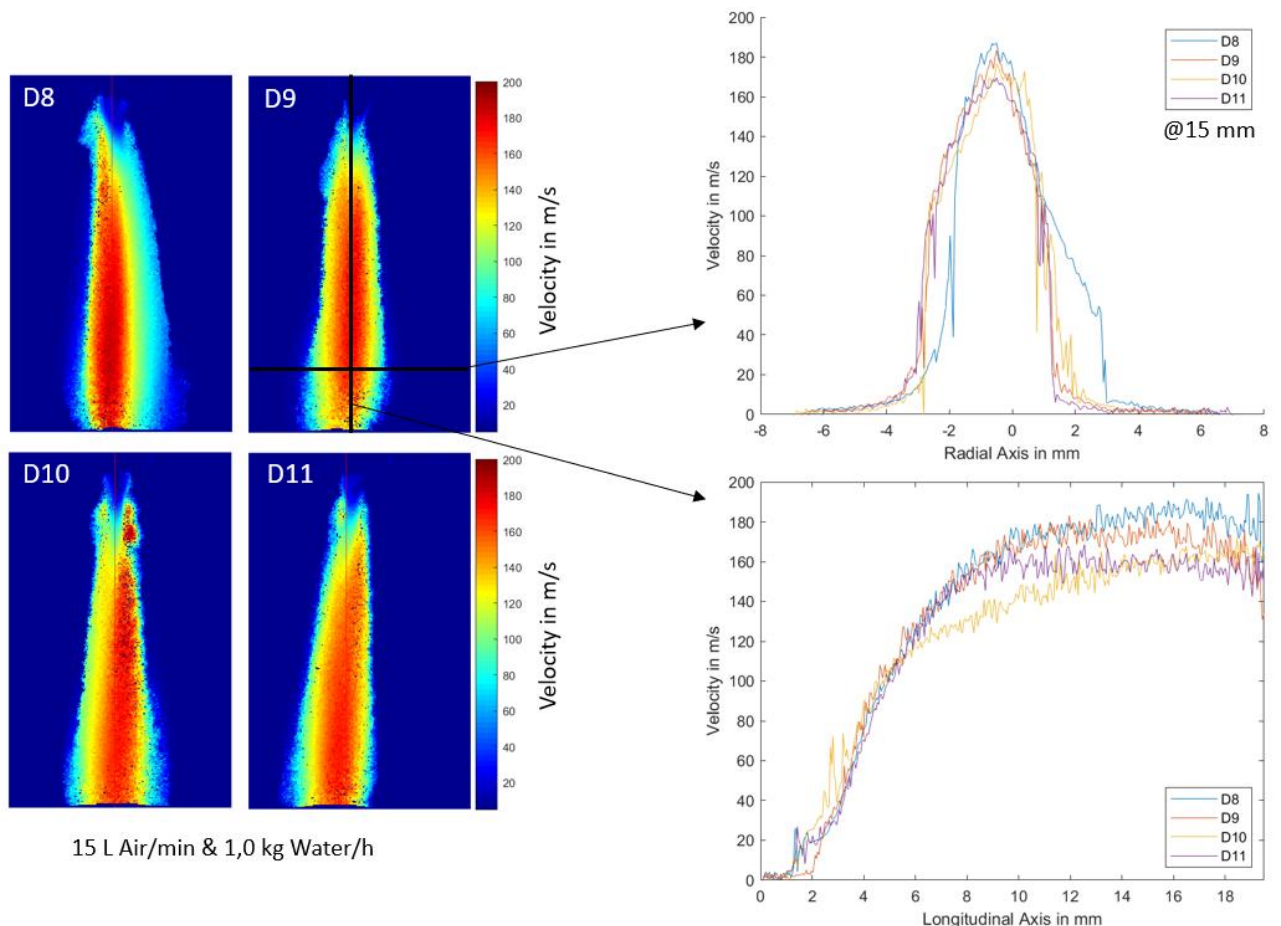


Abbildung 8: SIV-Geschwindigkeitsfelder und -profile im Vergleich (15 L Luft/min und 1 kg Wasser/h)

Grundsätzlich kann im Vergleich zu den Spraywinkeln eine erhöhte Konsistenz der Spraygeschwindigkeiten festgestellt werden. Jedoch sind auch bei den Spraygeschwindigkeiten die Auswirkungen infolge der unterschiedlich geformten Düsenöffnungen zu erkennen. Dies ist insbesondere für die Düsen der Fall bei denen die auf den Geschwindigkeitsfeldern gezeigten, hohen Geschwindigkeiten zu einer Seite verschoben sind. Als Beispiel kann hier allen voran Düse 8 hinzugezogen werden. Der Bereich der hohen Geschwindigkeiten ist im Geschwindigkeitsfeld deutlich auf die linke Seite verschoben. Der Übergangsbereich bzw. der scheinbare Sprayrand ist auf der linken Seite zudem sehr schmal, während der Sprayrand auf der rechten Seite sehr breit ist und ein ausgeprägtes Geschwindigkeitsprofil besitzt. Dies wird ebenso durch das radiale Geschwindigkeitsprofil der Düse 8 wiedergegeben. Dies ist auf ungleiche Verteilung der Flüssigmasse zurückzuführen. Wie bereits erwähnt, wird im Falle der Düse 8 der Großteil der Masse über die rechte Sprayseite transportiert. Mehr Masse bzw. größere Tropfen bedeutet eine größere Trägheit und weniger schnell beschleunigte Tropfen. Auf der linken Sprayseite fällt deutlich weniger Flüssigmasse an, weshalb feinere Tropfen auf diese Seite entstehen, die schnell beschleunigt werden bzw. größere Geschwindigkeiten erreichen. Infolge der hohen Geschwindigkeiten zerfallen die Tropfen auf diese Seite jedoch auch schneller zu noch feineren Tropfen, die aufgrund der limitierten Auflösung durch den SIV Algorithmus nicht mehr als solche erkannt werden können. Deshalb wird der Sprayrand durch die Geschwindigkeitsfelder als sehr schmal interpretiert, was sich durch die Rohbilder jedoch nicht bestätigen lässt.

Tropfengrößen und -Geschwindigkeiten

Die Messung von Tropfengrößen und Tropfengeschwindigkeiten erfolgte mittels Phasen Doppler Anemometrie (PDA) [3]. Dabei wird über zwei sich kreuzende Laserstrahlen innerhalb des Sprays ein Messvolumen erzeugt. Das Streulicht das entsteht, wenn ein Tropfen das Messvolumen durchquert, wird von einem Receiver detektiert. Das Messprinzip wird durch Abbildung 9 veranschaulicht. Die Frequenz des Streulichts ist je nach Geschwindigkeit des Tropfens gegenüber der Frequenz des initialen Laserstrahls dopplerverschoben. Auf Basis dieser Dopplerverschiebung kann dann auf die Tropfengeschwindigkeit zurückgerechnet werden. Weiterhin bietet das System die Möglichkeit, auf Basis des Phasenversatzes des gleichen Tropfensignals an mehreren Detektoren innerhalb des Receivers einen Tropfendurchmesser zu ermitteln.

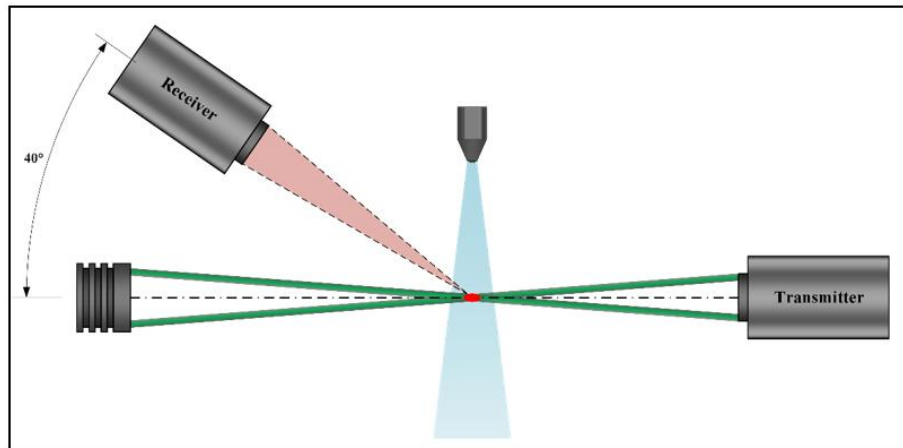


Abbildung 9: Schematischer Aufbau des PDA Setups

Da die PDA eine Punktesstechnik ist und eine Aussage über das gesamte Spray somit nur durch eine Vielzahl von Messpunkten ermöglicht wird, wurde hier der Umfang an Betriebspunkten und Düsen verringert. Es wurden 6 Düsen in zwei Betriebspunkten vermessen. Es wurden dazu jeweils Messpunkte entlang einer düsen nahen Achse mit einem Abstand von 35 bzw. 50 mm und in einer düsenfernen Achse mit einem Abstand von 100 mm erzeugt. Wie bereits zuvor erwähnt, ist der minimale Messabstand zur Düsenöffnung aufgrund des Messprinzips limitiert. Grund dafür ist ein mit der Verringerung des Düsenabstands einhergehendes abnehmendes Signal-Rausch-Verhältnis infolge der zunehmenden Tropfendichte. Es wurde zusätzlich eine weitere Düse (D11) der Vollständigkeit halber mit allen Betriebspunkten aus **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** aber möglichst düsen nah vermessen, welche zudem als erste Datengrundlage für die Simulationen genutzt wurde.

Unter Abbildung 10 (a) sind für Düse 11 im Abstand von 15 mm zur Düse beispielhaft Histogramme von Tropfendurchmessern für jede Messposition entlang der Messachse für den Betriebspunkt 10 L Luft/min und 1 kg Wasser/h aufgetragen. Für jede Messposition ist zudem der Sauterdurchmesser (rot) und der mittlere Durchmesser (lila) markiert. Es ist zusätzliche die mittlere Tropfengeschwindigkeit inklusive Standardabweichung (b) und der Sauterdurchmesser sowie der mittlere Durchmesser (c) in separaten Diagrammen geplottet. Unter diesen Betriebspunkten zeigt sich, dass sich im Zentrum des Sprays die größten Tropfen befinden. Zu den Sprayrändern hin verschiebt sich das Tropfenspektrum in Richtung kleiner Durchmesser, wobei auch die Tropfendurchmesser verteilung stärker in Richtung der kleinste Tropfen gewichtet ist. Weiterhin werden im Zentrum des Sprays auch die höchsten Geschwindigkeiten erreicht.

In Abbildung 11 sind hingegen die sechs vermessenen Düsen im Abstand von 35 mm bzw. 50 mm in den Betriebspunkten 10 L Luft/min und 1 kg Wasser/h bzw. 15 L Luft/min und 1,5 kg Wasser/h aufgetragen. Während die Tropfengeschwindigkeiten sich mit dem Verlauf aus Abbildung 10 decken, so zeigen die Tropfendurchmesser ein entgegengesetztes Verhalten. Insbesondere für 10 L Luft/min und 1 kg Wasser/h zeigen die Tropfendurchmesser ein eindeutiges Minimum im Sprayzentrum und ansteigende Durchmesser zu den Sprayrändern. Für 15 L Luft/min und 1,5 kg Wasser/h gleichen sich die Tropfendurchmesser über den Sprayquerschnitt bereits sehr stark an, jedoch ist teilweise ein steigender Tropfendurchmesser zum Sprayrand noch immer erkennbar. Es wird vermutet, dass sich diese entgegengesetzten Verläufe für die Tropfendurchmesser aus Abbildung 10 und Abbildung 11 auf den Düsenabstand zurückführen lassen. Um eine eindeutige Aussage dazu treffen zu können, sind weitere Messungen in einem Düsenabstand zwischen 15 mm und 35 mm geplant. Aus Abbildung 11 ist weiterhin zu entnehmen, dass die Düsen zwar hinsichtlich Tropfengeschwindigkeit und Tropfendurchmesser eine gewisse Streuung aufweisen, die Verläufe aber zum Großteil und unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Düsengeometrien sehr ähnlich zueinander sind. Nur vereinzelt sind größere Differenzen zu erkennen - wie z.B. für Düse 7. Für diese Düse sind die Geschwindigkeiten im Sprayzentrum im Vergleich zu den anderen Düsen deutlich verringert. Diese Eigenschaft ist über beide dargestellten Betriebspunkte erkennbar, womit ein Messfehler ausgeschlossen werden kann. Dieser Unterschied ist jedoch nur in der düsen nahen Messachse erkennbar. Bei zunehmender

Düsensdistanz gleichen sich die Tropfengeschwindigkeiten jedoch auch für diese Düse an.

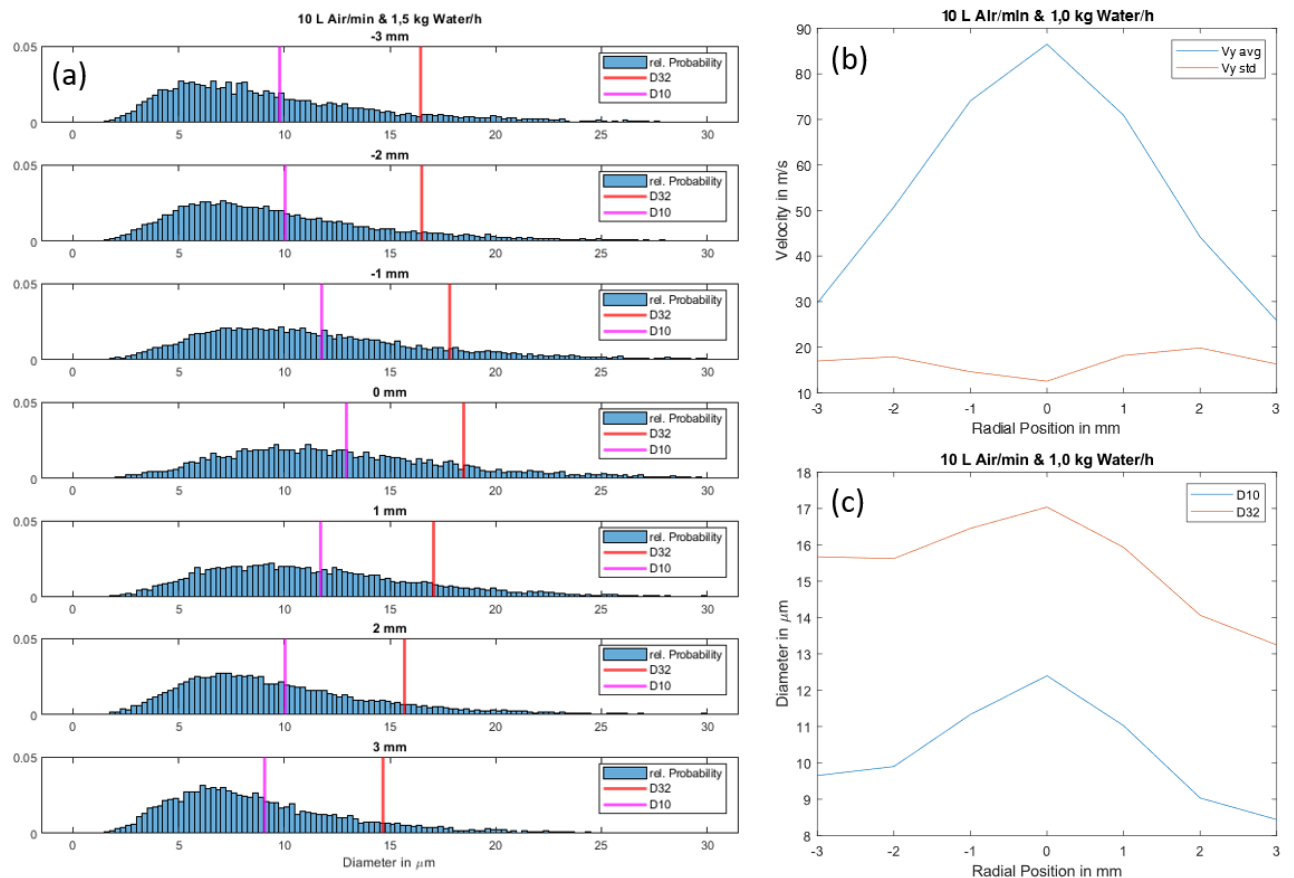


Abbildung 10: Histogramm der Tropfendurchmesser (mit arithmetischem Durchmesser D10 und Sauterdurchmesser D32) (a), Mittlere Tropfengeschwindigkeit und Standardabweichung (b); arithmetischer Durchmesser (D10) und Sauterdurchmesser (D32) (c) für 10 L Luft/Minute und 1 kg Wasser/h im Abstand von 15 mm zur Düse

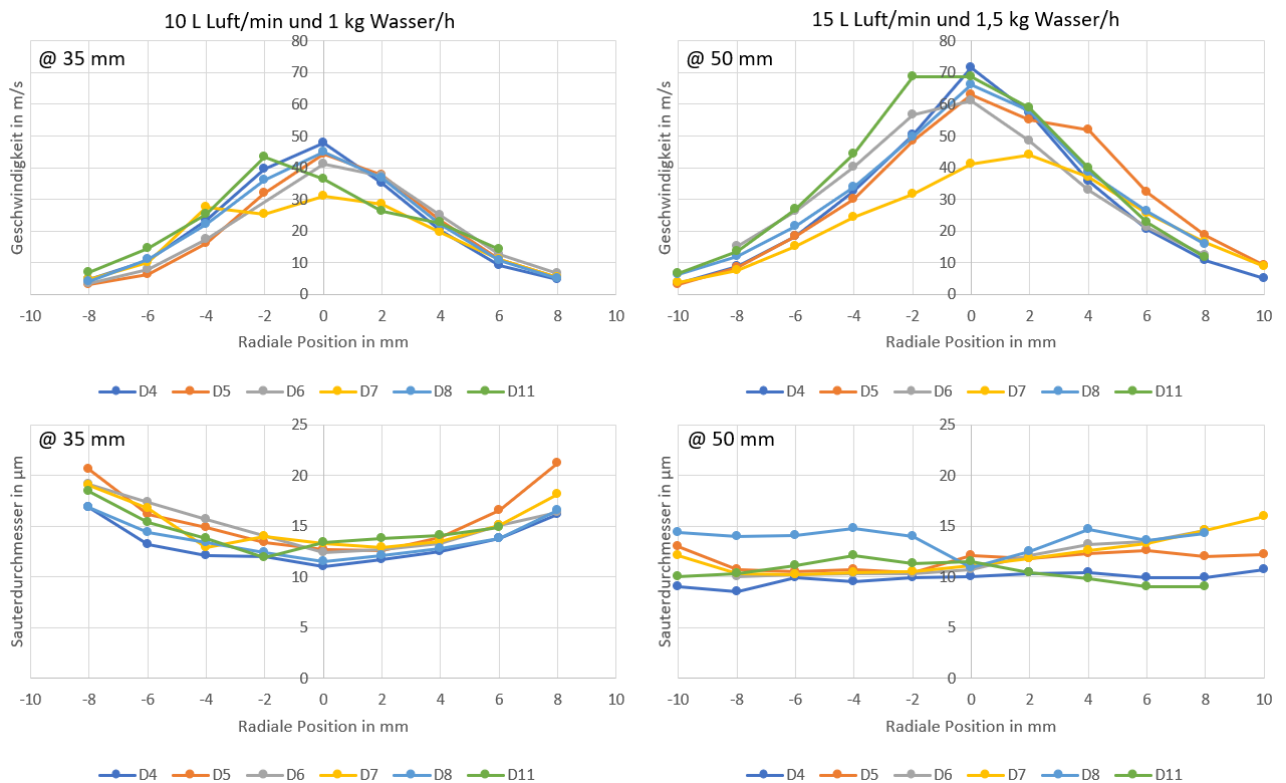


Abbildung 11: Tropfengeschwindigkeiten und Sauterdurchmesser (D32) für verschiedene Düsen

AP 1.2 (a) Aufbau der Prototypen (LUH und EP)

Für die weiteren Untersuchungen wurde eine neue Mischstrecke (DN300) mit entsprechenden optischen Zugängen entwickelt, die an den bestehenden Heißgaserzeuger und an die Prüfstandinfrastruktur am Institut für Technische Verbrennung angeschlossen werden kann. Die Entwicklung der Konstruktion erfolgte in enger Zusammenarbeit der LUH und der Konstruktionsabteilung von EP. Die Fertigung wurde zum Teil durch EP selbst ausgeführt, wobei die Fertigung des Hauptsegments (siehe Abbildung 12) aufgrund erhöhter Komplexität extern beauftragt wurde. Die Lieferung an die LUH erfolgte Ende Mai 2023. Das Hauptsegment wird dazu durch ein Adapterstück und ein Endstück ergänzt. Das Adapterstück wird benötigt, um das Hauptsegment mit dem existierenden Heißgaserzeuger zu verbinden, während das Endstück dazu dient, die Abgase in eine entsprechende Absaugung zu transportieren. Das Hauptsegment ist zudem mit einer Aufnahme versehen, mit der die verwendeten Albonair Zweistoffdüsen implementiert werden können. Das Mittelstück der Aufnahme ist dabei austauschbar, sodass die Düsen ggf. auch mit einem Anstellwinkel verbaut werden können. Senkrecht zur Düsenaufnahme sind zwei gegenüberliegende Schauglasflansche mit Borosilikatfenstern vorgesehen, um die optischen Messungen zu ermöglichen. Dabei wurden die Flansche in Rechteckform ausgeführt, um den möglichen Sichtbereich zu maximieren. Alle weiteren Anpassungen der Mischstrecke, die für die Bearbeitung ab AP 3 notwendig sind, werden durch die LUH selbst vorgenommen.

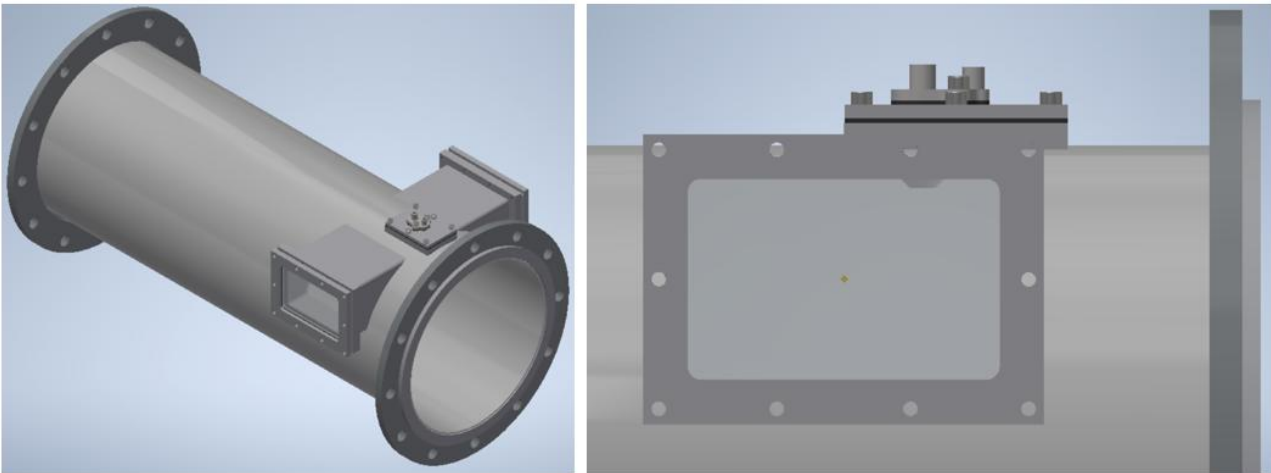


Abbildung 12: Konstruktion der Mischstrecke DN300 (links Hauptsegment, rechts Schauglasflansch mit hereinragender Düsen spitze)

An dieser Stelle sei zudem erwähnt, dass als Modifikation des Projektplanes aufgrund der stark gestiegenen Preise für Material und Fertigung nur eine Mischstrecke (DN300) statt zwei verschiedener Mischstrecken (DN300 und DN100) gefertigt wurden. Da im Rahmen der Feldtest im AP 6 auf Seiten von EP noch große Kostenpunkte anstanden, wurde so ein ausreichender Puffer zurückgehalten werden.

AP 1.2 (b) Grundgerüst des digitalen Abbilds (TUB)

Dieses Arbeitspaket zielte darauf ab, einen vorläufigen numerischen Modellierungsansatz zu entwickeln, der die komplexen Mechanismen berücksichtigt, die in der Abgas-SCR auftreten. Das System wurde auf seine allgemeine Genauigkeit und Stabilität getestet. Weitere detaillierte Untersuchungen der Systemgenauigkeit wurden in den nachfolgenden Arbeitspaketen durchgeführt, wobei die erhaltenen experimentellen Daten als Referenz dienten.

Modellierung der Eindüsung und der Verteilung des Tropfendurchmessers

Die experimentellen Ergebnisse der Betriebspunkte 7, 8 und 9 von AP 1.1. wurden für die erste Stufe der Erstellung des numerischen Rahmens verwendet. Die Durchflussmenge, der Spraywinkel und die Verteilung des Tropfendurchmessers in der Nähe der Düse wurden zur Initialisierung der Eindüsung aus einem Vollkegelinjektor verwendet. Es wurde ein allgemeiner Aufbau mit einer kubischen Domäne verwendet. Abbildung 13 (a), (b) und (c) zeigen die berechneten Rosin-Rammler-Verteilungsparameter für die entsprechenden experimentellen Daten. Die Berechnungen mit einem einzigen Flüssigkeitsinjektor führte zu einer guten Übereinstimmung zwischen Experimenten und Simulation und wird für die geplanten numerischen Studien in den folgenden Arbeitspaketen dieses Projekts verwendet werden.

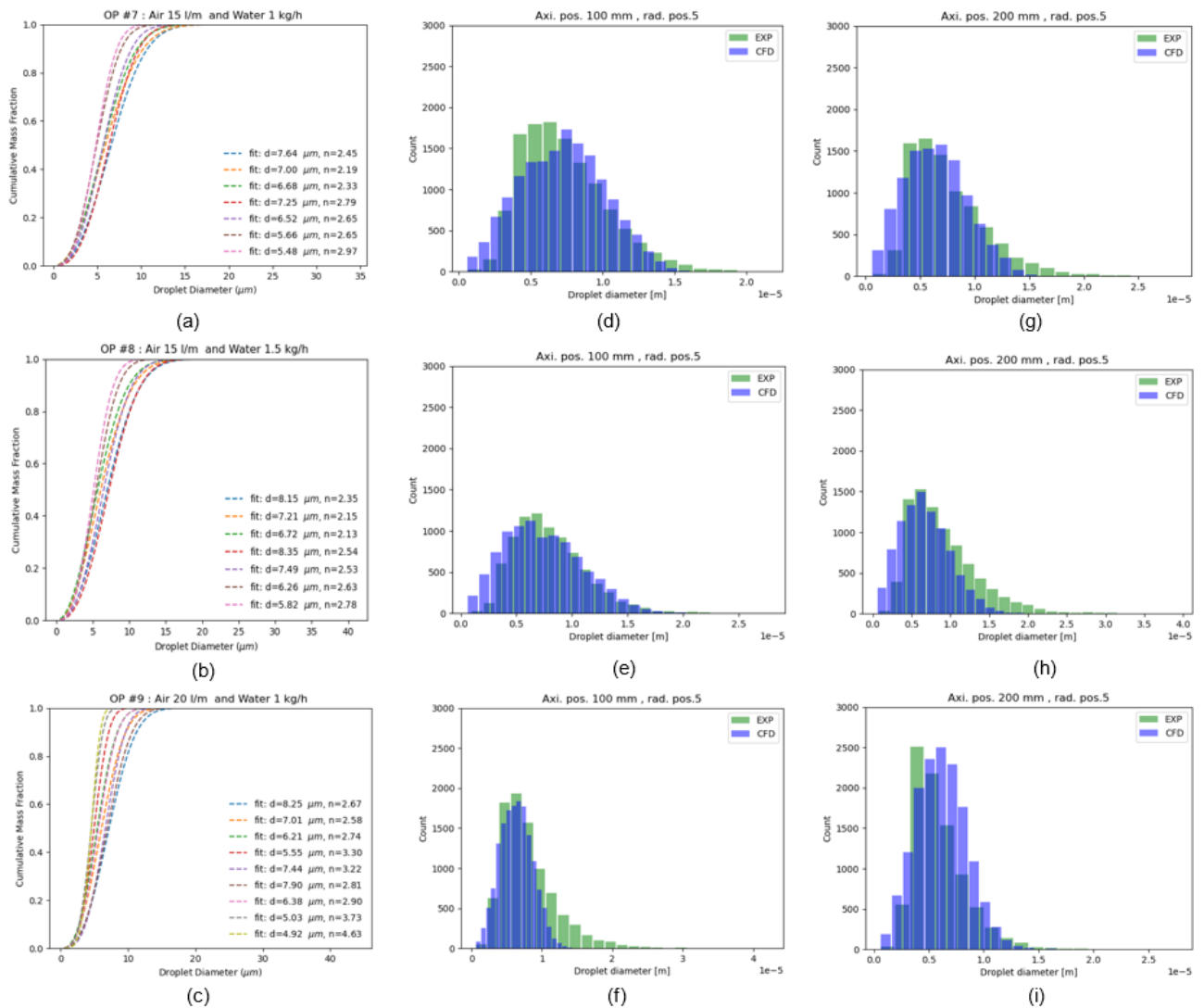


Abbildung 13: Rosin-Rammler-Parameter, berechnet für die experimentellen Betriebspunkte 7 (a), 8 (b) und 9 (c). Die Verteilung des Tropfendurchmessers für die radiale Position 5 ist für die axiale Position 100 mm und 200 mm für OP 7 (d) & (g), für OP8 (e) & (h) und OP9

Für die Zerstäubung wurden gemittelte Werte der Rosin-Rammler-Verteilungsparameter verwendet. Das Spray wird mit einem Lagrangeschen Ansatz modelliert. Obwohl das Spray in den Experimenten aus einer Zweistoffdüse eingespritzt wird, wurde in den Simulationen nur der Wasserstrom berücksichtigt. Aus numerischer Sicht ist der Einfluss des Luftstroms vernachlässigbar. Er kann als Trägheitseffekt über die kalibrierten Tropfengeschwindigkeiten auf der Grundlage der experimentellen Ergebnisse dargestellt werden (siehe Abb. 1 (d), (e), (f) und (g) um Redundanz in diesem Bericht zu vermeiden, wird hier von jeder axialen Position eine radiale Position aufgetragen).

Einzeltröpfenverdampfung

Vor der Entwicklung des integrierten numerischen Rahmens wurde das Standardmodell der Tropfenverdampfung in STAR-CCM+ getestet. Zur Validierung wurden experimentelle Ergebnisse aus der Arbeit von Musa et al. [4] verwendet, wie in Abbildung 14 dargestellt. Der Vergleich der numerischen Simulationen mit den Referenzdaten zeigte eine erhebliche Diskrepanz zwischen dem dimensionslosen Tropfendurchmesser und der erforderlichen Verdunstungszeit. Daher waren weitere numerische Untersuchungen zur Verbesserung der Modellgenauigkeit erforderlich, die Teil des AP 3 gewesen sind.

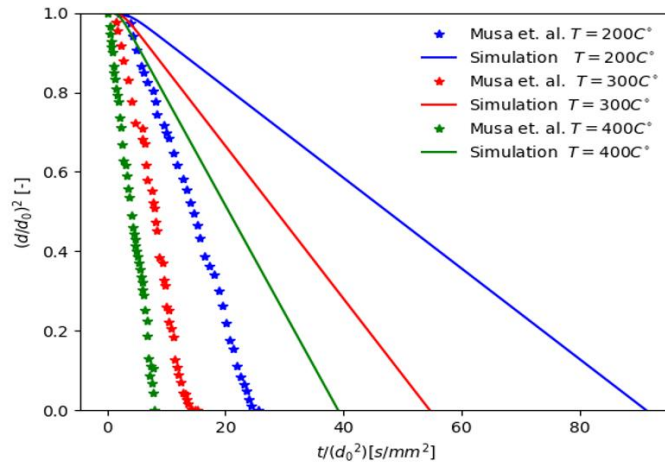


Abbildung 14: Aus den Simulationen ermittelte Verdunstungscharakteristiken für verschiedene Temperaturen im Vergleich zur Arbeit von Musa et al. [4]

Integrierter numerischer Rahmen

Bei der Entwicklung des numerischen Rahmens wurde ein systematischer Ansatz gewählt, um verschiedene Modelle und Mechanismen zu integrieren. Zunächst wurde ein Einkomponentenfluid (Wasser) als Spray in den Abgaskanal in einem isothermen Aufbau eingebracht. Abbildung 15 (a) und (b) zeigen die CAD-Geometrie und das für diese Simulation verwendete Netz, während Abbildung 15 (c) einen Überblick über die erhaltene Fluidströmung und das Spray zeigt. Zweitens wurde der numerische Rahmen erweitert, um neben der Hydrodynamik auch den Wärmeübergang zwischen dem Abgas und dem Spray zu berücksichtigen. Drittens wurde nach der Feststellung der Stabilität der thermo-fluidischen dynamischen Kopplung im System der numerische Rahmen schließlich um die Tropfenverdampfung erweitert. Wie in Abb. 3 gezeigt, wurde (c) ein Wasserspray aus einem festen Kegelinjektor in die Abgaskammer eingebracht. Das Wasserspray wurde als einphasige Lagrangesche Partikel modelliert, während das Abgas als kontinuierliche Eulersche Phase behandelt wurde. Für diese Analyse wurde eine ideale Zustandsgleichung verwendet. Die two-equation Realizable $k - \varepsilon$ Turbulenzmodell wurde zusammen mit Wandbehandlungsfunktionen verwendet. Für die Lagrange-Phase werden die Turbulenzausbreitung und die auf die Tropfen wirkenden Kräfte (Widerstand, Scherung und Kopplung) zusammen mit dem sekundären Auflösungsmodell berücksichtigt.

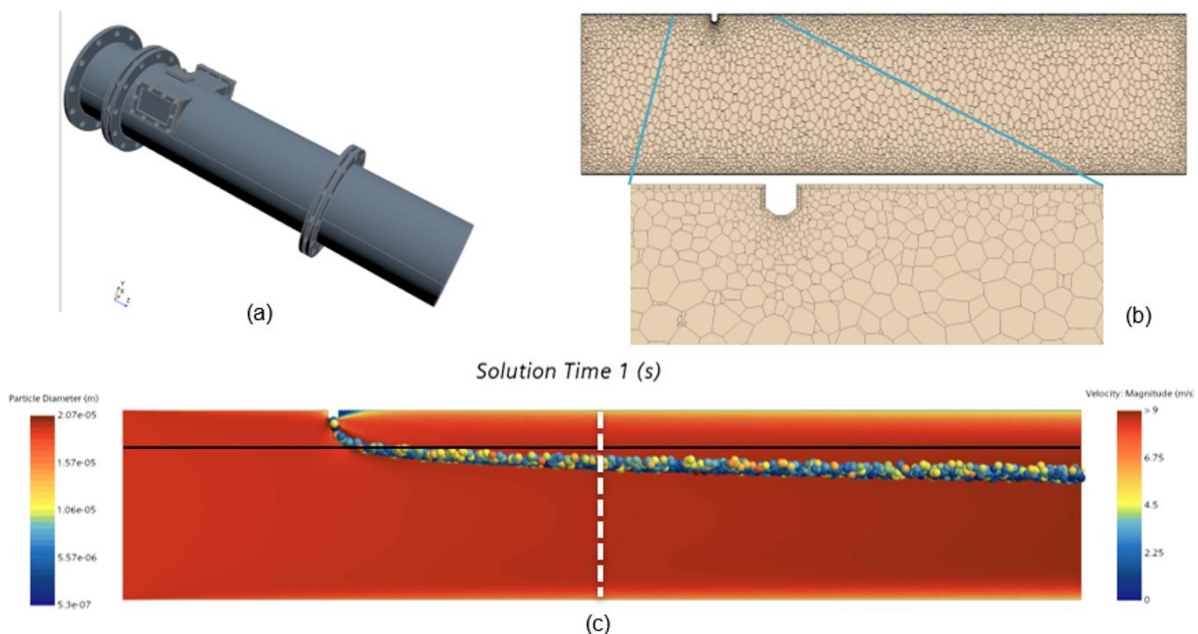


Abbildung 15: Darstellung der ursprünglichen CAD-Geometrie, die für die Experimente und die Simulationen verwendet wurde (a), numerisches Gitter (b) und mittleres Geschwindigkeitsprofil des Strömungsfelds mit Tropfen (c). (Die Größe der Tropfen ist zur besseren Veranschaulichung vergrößert).

Die für dieses Projekt geplanten Simulationen wurden mit der Software STAR-CCM+ (in C++ geschrieben) durchgeführt. Der für Strömung und Wärmeübertragung verwendete Solver ist der Coupled Temperature Solver. Unter Verwendung eines impliziten Zeitschrittschemas wurde dieser Solver verwendet, um die Temperatur-, Geschwindigkeits- und Druckfelder instationär zu berechnen. Der SIMPLE-Algorithmus wurde für die Druck-Geschwindigkeits-Kopplung verwendet. Während der parallelen Ausführung der Simulationen

wurde die Kommunikation zwischen den Knoten durch eine MPI-Implementierung (Message Passing Interface) erreicht. Eine qualitative Untersuchung der Ergebnisse dieser Studie zeigte, dass die Kopplung der Modelle stabil ist. Das simulierte Sprayverhalten und das Abgasströmungsfeld weisen eine allgemeine Genauigkeit auf, die im Rahmen der nachfolgenden Arbeitspakete weiter untersucht und korrigiert wurde.

Studie über die Konvergenz der Netze

Die Auswirkung der räumlichen Auflösung auf das integrierte numerische System wurde anhand einer Gitterkonvergenzstudie untersucht. In Anbetracht des industriellen Charakters des Projekts wird sich ein hochauflösendes Gitter drastisch auf die Kosten und die Effizienz des numerischen Rahmens auswirken. Daher wurden sechs Gitter mit Auflösungen von 22 bis 330 Tausend Maschenzellen untersucht. Ein Beispiel für die erzielten Ergebnisse ist in Abbildung 16 dargestellt. Die mittlere Geschwindigkeit des Abgasstroms wurde über eine Linie quer durch den gesamten Bereich abgetastet (die Abtastlinie ist durch die schwarze Linie in Abb. 3 (c) gekennzeichnet). Die Ergebnisse zeigen keinen signifikanten Einfluss der Netzauflösung auf das Fernfeld vor der Düse. Allerdings wurde in den Regionen vor und nach der Düse eine Unter- bzw. Überschätzung der mittleren Geschwindigkeitsgröße beobachtet. Das Gitter mit 71 Tausend Maschenzellen bietet ein akzeptables Gleichgewicht zwischen Genauigkeit und Rechenkosten und wird für künftige Studien verwendet werden.

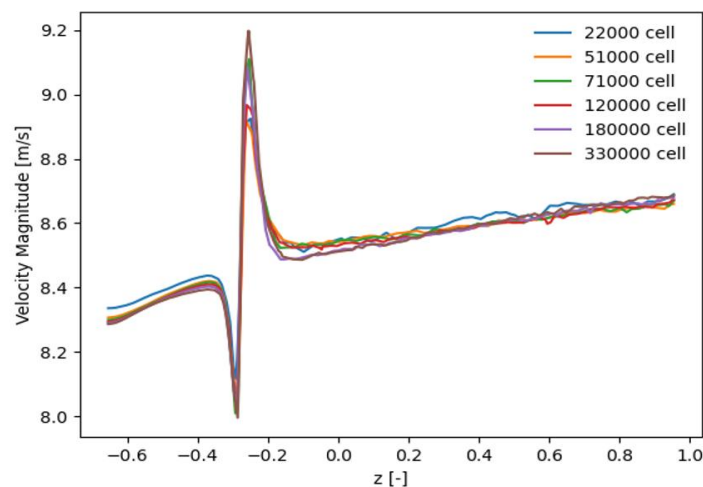


Abbildung 16: Einfluss der Gitterauflösung auf die Größe der Durchschnittsgeschwindigkeit des Abgasstroms im Prüfstand (die Ergebnisse werden über die hintere Linie abgetastet, wie in Abb. 3 (c) angegeben).

Sensitivitätsstudie zur Turbulenzmodellierung

Die Wahl des Turbulenzmodells kann einen erheblichen Einfluss auf die Genauigkeit der Simulationen der Spraydispersion in einem Strömungsfeld haben. Daher ist es wichtig, die Empfindlichkeit verschiedener Turbulenzmodelle für eine bestimmte Sprayanwendung zu bewerten, um sicherzustellen, dass das gewählte Modell das physikalische Verhalten des Spraynebels genau erfassen kann. Eine Sensitivitätsanalyse kann dabei helfen, das am besten geeignete Turbulenzmodell zu bestimmen, indem die vorhergesagten Sprayeigenschaften verschiedener Modelle verglichen werden, um die Sensitivitäten zu ermitteln. Für diese Analyse wurde der etablierte numerische Rahmen in Kombination mit drei Reynolds Average Navier-Stokes (RANS) Turbulenzschlussmodellen untersucht. Die untersuchten Modelle sind two-equation Realizable $k - \epsilon$, two-equation $k - \omega - SST$ und three-equation Reynolds Stress Model (RSM). Die Ergebnisse der untersuchten Turbulenzmodelle werden für die Divergenz verglichen, wie in Abbildung 17 dargestellt. Während eine signifikante Abweichung von 26 % bei den von RSM und $k - \epsilon$ Modellen vorhergesagten Tropfendurchmesserverteilungen zu beobachten ist (Abbildung 17 (a)), ist eine geringfügige Abweichung von etwa 7 % zwischen der Leistung von RSM und $k - \omega - SST$ festzustellen. Alle drei Modelle ergaben jedoch das gleiche mittlere Geschwindigkeitsprofil (Abbildung 17 (b)). Gegenwärtig ist die allgemein angewandte two-equation Realizable $k - \epsilon$ Modell wird im numerischen Rahmen verwendet. Eine weitere Überprüfung der Genauigkeit ist im Rahmen des AP 2.3 geplant.

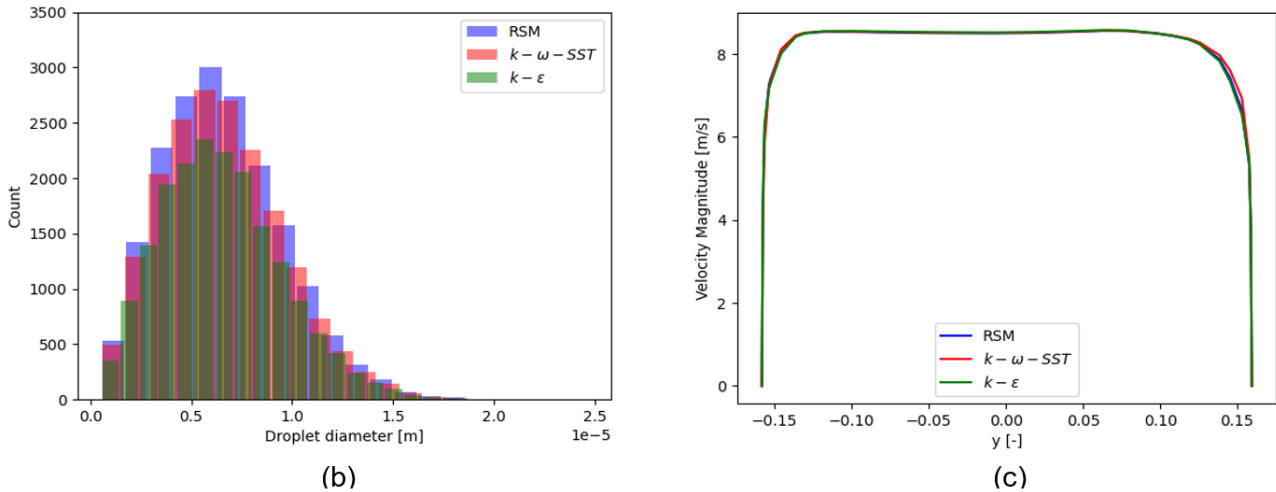


Abbildung 17: Die Verteilung des Tropfendurchmessers als Ergebnis verschiedener Turbulenzmodelle (a) und der mittlere Geschwindigkeitswert (b) sind oberhalb der gestrichelten weißen Linie in Abb. 3 (c) aufgetragen.

Arbeitspaket 2: Sprayuntersuchungen

Das zweite Arbeitspaket ist in vier Unterpakete aufgeteilt. Die Arbeitspakete werden durch die Projektpartner wie folgt bearbeitet:

- | | |
|--|-----|
| • AP 2.1 Messungen Spraywinkel und Charakterisierung Sprayaufbruch | LUH |
| • AP 2.2 Messungen Tropfengrößenverteilung | LUH |
| • AP 2.3 Simulation Sprayausbreitung | TUB |
| • AP 2.4 Designstudie | TUB |

AP 2.1 Messungen Spraywinkel und Charakterisierung Sprayaufbruch

Das Arbeitspaket unterlag einer Verzögerung, konnte aber inzwischen bearbeitet werden. Es wurden Aufnahmen des Sprays mit Beaufschlagung einer heißen Querströmung im vollständig aufgebauten Prüfstand erzeugt. Es konnte gezeigt werden, dass die gemessenen Größen (Winkel und Spraygeschwindigkeit) den unter AP 1.1 gemessenen Werten entsprechen. Im Folgenden wird der Zusammenhang zu den Ergebnissen aus AP 1.1 aufgezeigt.

Abbildung 18 zeigt dazu den Spraywinkel einmal für die grundlegende Vermessung ohne Querströmung und unter kalten Bedingungen aus AP 1 (links) und unter Beaufschlagung mit einer Heißgasströmung aus AP 2 (rechts) jeweils für die gleiche Düse. Der Spraywinkel variiert dabei nur um eine Nachkommastelle. Die Verkippung aus AP 1 ist nicht mehr zu erkennen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Düse am Heißgasprüfstand in einer anderen Orientierung verbaut ist, sodass die betrachtete Ebene im Spray von AP 2 senkrecht auf der betrachteten Ebene aus AP 1 steht. Grundsätzlich kann jedoch festgehalten werden, dass sich der düsennahe Spraywinkel unter Beaufschlagung einer Querströmung nicht signifikant von denen aus AP 1 unterscheidet. Eine Analyse des Spraywinkels in größerer Distanz von der Düse erwies sich als wenig zweckmäßig. Aufgrund der dynamischen zeitabhängigen Sprayform durch den zunehmenden Einfluss von Querströmung und beginnender Verdampfung stromabwärts, ließ sich keine stationäre Situation erfassen, in der eine Winkelbestimmung sinnvoll gewesen wäre.

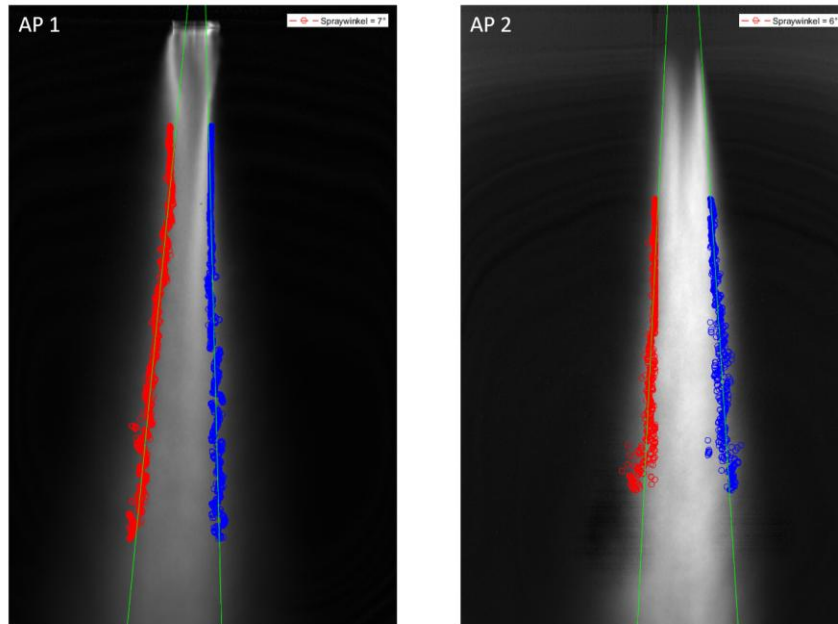


Abbildung 18: Vergleich Spraywinkel AP 1 (links) und AP 2 (rechts) bei 20 L Luft/min und 1,5 kg Urea/h

Abbildung 19 zeigt einerseits die Geschwindigkeitsfelder für die Grundlagenvermessung aus AP 1 sowie unter Beaufschlagung einer Querströmung aus AP 2. Zusätzlich werden die Geschwindigkeitsverläufe entlang der zentralen Sprayachse dargestellt. Da für Spraygeschwindigkeit und Spraywinkel die gleiche Messtechnik zum Einsatz kommt, steht auch hier die Messebene aus AP 2 senkrecht auf der Messebene aus AP 1, wodurch die Abweichungen in den Verläufen zu begründen sind. Grundsätzlich ist aber zu sagen, dass die Ausbildung der Geschwindigkeitsfelder auf sehr ähnliche Weise geschieht und die Geschwindigkeiten insgesamt auf vergleichbaren Niveaus liegen. Auch auf die düsen nahen Geschwindigkeiten kann kein signifikanter Einfluss der Querströmung beobachtet werden.

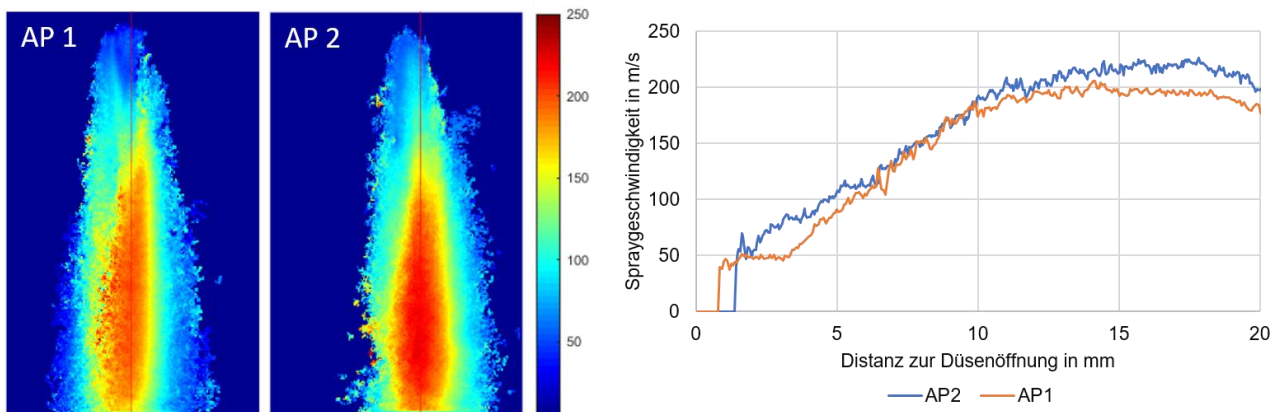


Abbildung 19: Vergleich Spraygeschwindigkeiten AP 1 (links) und AP 2 (rechts) bei 20 L Luft/min und 1,5 kg Urea/h

AP 2.2 Messungen Tropfengrößenverteilung

Da das Spray aufgrund seiner feinen Zerstäubung einer schnellen Verdampfung unterlag, wurde auf eine weitere aufwändige Messung der Tropfengrößen-Verteilung am Heißgasprüfstand unter Einsatz der Querströmung verzichtet. In den folgenden AP wird deutlich, dass mit den verwendeten Tropfengrößen hohe Korrelationen zwischen Simulationen und Experimenten erreicht werden konnte.

AP 2.3 Simulation Sprayausbreitung

Um die Sprayeigenschaften numerisch zu beschreiben, werden die experimentellen Ergebnisse aus AP 1 und AP 2 als Randbedingungen und zum Vergleich der Ergebnisse verwendet. Ein numerischer Ansatz mit einem Ein-Fluid-Ansatz zielt darauf ab, das Gleichgewicht zwischen Genauigkeit und Berechnungseffizienz zu optimieren und eine qualitative Methodik bereitzustellen. Die Vereinfachung basiert auf der Frage, ob das Zweifluidzerstäubungsspray effizient modelliert werden kann, indem nur die Flüssigkeitströpfchen verwendet werden. Um eine Antwort zu finden, wird ein einphasiger Feststoffkegelinjektor mit aus den Experimenten abgeleiteten Randbedingungen initialisiert. Zu diesen Bedingungen gehören Parameter wie Massendurchsatz, Spraywinkel und Partikelgrößenverteilung. Die Spraydynamik wird mit Hilfe eines Lagrange-Euler gekoppelten Rahmens modelliert, der die aerodynamische Wechselwirkung zwischen der statischen Euler-Phase (Luft) und den dispergierten Tröpfchen charakterisiert. Zur Schätzung des Widerstandskoeffizienten wird das Schiller-Naumann-Modell verwendet. Die Scher- und Auftriebskoeffizienten im Modellierungsparadigma werden mit dem rigorosen Sommerfeld-Ansatz bestimmt. Die Zerstäubungsluftkomponente wird als vernachlässigbar angesehen, und ihr Einfluss auf das System wird durch die Schätzung der Gesamtgeschwindigkeit des Sprays berücksichtigt. Es ist zu beachten, dass davon ausgegangen wird, dass die betrachteten Tröpfchen vor ihrer Injektion in das Berechnungsgebiet zerstäubt wurden. Die Tröpfcheninitialisierungsgeschwindigkeit wird als Durchschnitt der Luft- und Wassergeschwindigkeiten auf der Grundlage der geometrischen Spezifikationen der Düse und des angewandten Massendurchsatzes für OP1, 6 und 8 berechnet.

Um den Bereich nahe der Düse genau zu simulieren, würden sehr aufwändige detaillierte Simulations-Methoden wie LES und DNS benötigt. Diese Methoden sind jedoch nicht für groß angelegte industrielle Studien geeignet, insbesondere wenn es um chemische Reaktionen geht. Daher konzentrieren wir uns auf die Modellierung von Wassertröpfchen, anstatt die beiden Fluide einschließlich des Luftstroms zu berücksichtigen, wie bereits erläutert.

Die Querschnittsfläche des Abgasrohrs illustriert die untersuchten Ebenen entlang der Sprayachse (siehe Abbildung 20). Die Einspritzung in eine ruhende Umgebung zeigte ein charakteristisches physikalisches Sprayverhalten

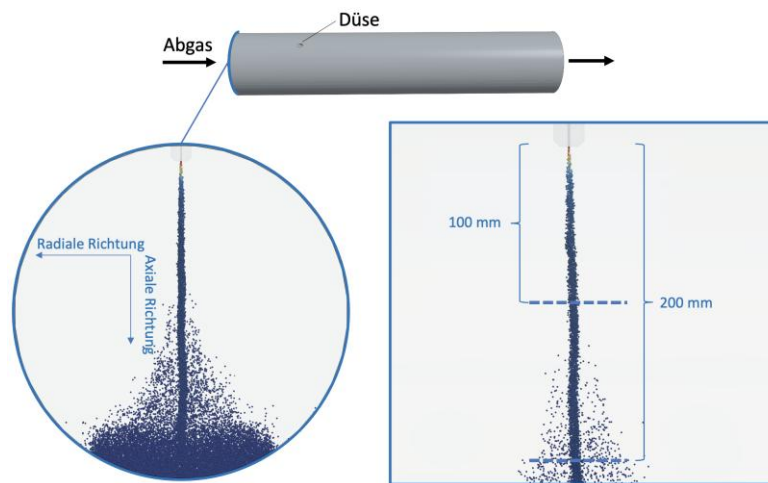


Abbildung 20: Eingespritztes Wasser (links). Ebenen 100 und 200 mm unterhalb der Düse (rechts)

Zur Validierung der Geschwindigkeitsverteilung wurde die mittlere Abweichung zwischen einer an den experimentellen Daten angepasster Parabel und der maximalen Tropfengeschwindigkeit in der Simulation berechnet. Zur Validierung der Tropfengrößenverteilung wurde die mittlere Abweichung zwischen der experimentellen und der simulierten Rosin-Rammler-Verteilung ermittelt.

Für den Betriebspunkt 6 sind die Abweichungen der Tropfengrößen- sowie Geschwindigkeitsverteilung am größten. Eine mögliche Erklärung liegt im Massenverhältnis zwischen der Luft und dem eingespritzten Stoff. Für Betriebspunkt 8 werden $3,0 \times 10^{-4}$ kg/s Luft und $4,0 \times 10^{-4}$ kg/s Wasser eingespritzt. Für Betriebspunkt 1 werden $1,5 \times 10^{-4}$ kg/s Luft und $1,4 \times 10^{-4}$ kg/s Wasser eingespritzt. Für Betriebspunkt 6 werden $3,0 \times 10^{-4}$ kg/s Luft und $1,3 \times 10^{-4}$ kg/s Wasser eingespritzt. Während für die Betriebspunkte 8 und 1 ausgeglichene Mengen an Luft und Wasser eingespritzt werden, beträgt der Massenanteil der Luft für den Betriebspunkt 6 etwa 70%. Somit ist der nicht simulierte Einfluss der Luftunterstützung relevanter. Abbildung 21 zeigt Tropfengrößen- sowie Geschwindigkeitsverteilung für BP 1 und Abbildung 22 selbiges für den BP 6.

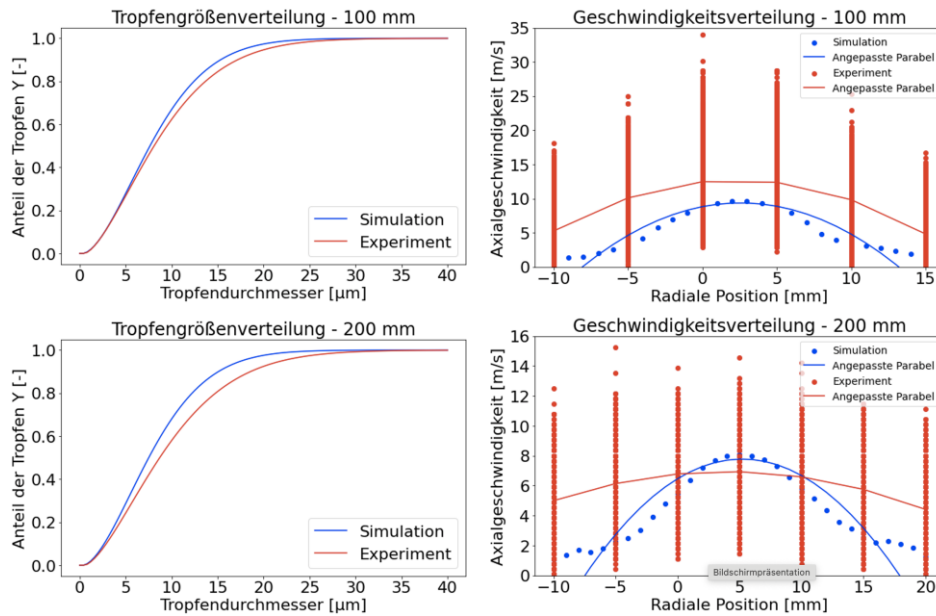


Abbildung 21: Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilung 100mm unterhalb der Düse (oben). Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilung 200mm unterhalb der Düse (unten). Betriebspunkt 1 [8 Lmin Luft und 0,5 kgH Harnstoff].

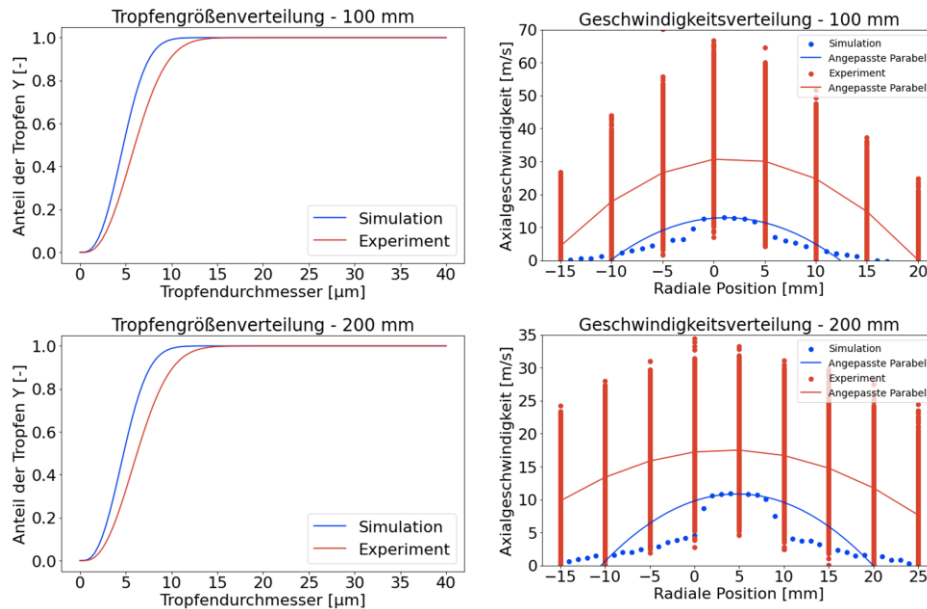


Abbildung 22: Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilung 100mm unterhalb der Düse (oben). Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilung 200mm unterhalb der Düse (unten). Betriebspunkt 6 [15 L min Luft und 0,5 kgH Harnstoff].

Für den Betriebspunkt 8 stimmen die Tropfengrößen mit dem Experiment überein, wobei die Abweichung weniger als 11% beträgt. In der Simulation ist die Axialgeschwindigkeit jedoch deutlich niedriger als im Experiment, mit einer Abweichung der Geschwindigkeitsverteilung von etwa 36% (siehe Abbildung 23).

Die Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung zwischen den Tröpfchengrößen- und Geschwindigkeitsverteilungen. Allerdings weisen die Geschwindigkeitsverteilungen unter erhebliche Unterschiede auf, weshalb auch numerische Untersuchungen mit einem Zwei-Fluid-Ansatz durchgeführt wurden, welche nachfolgend präsentiert werden.

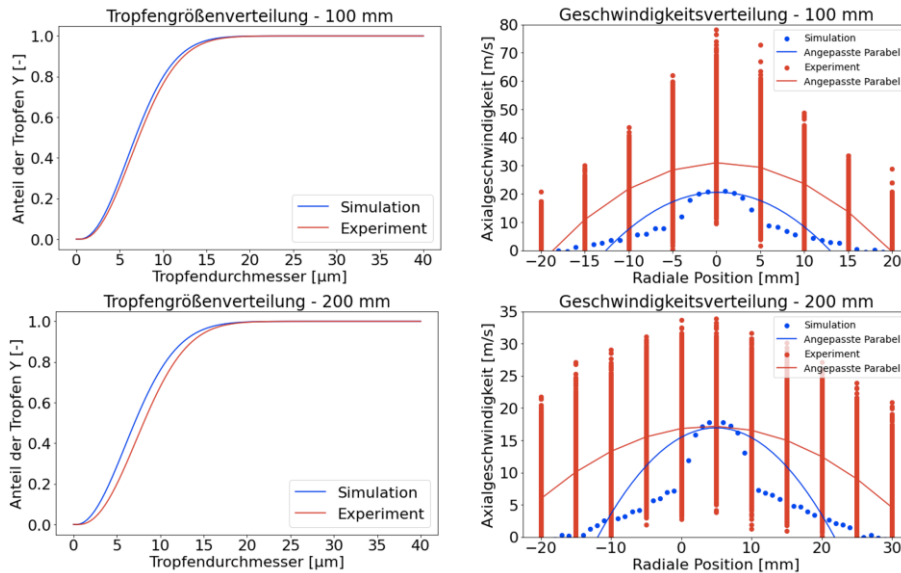


Abbildung 23: Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilung 100mm unterhalb der Düse (oben). Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilung 200mm unterhalb der Düse (unten). Betriebspunkt 8 [15 L min Luft und 1,5 kg/h Harnstoff].

Im Gegensatz zur reduzierten Einphaseneinspritzung soll das Modell erweitert werden, um den Versuchsaufbau besser darstellen zu können. Der Tropfenstrom wird mit einem gewinkelten Luftstrahl kombiniert, der direkt dem Düsenausgang entspringt. Da die Düse selbst nicht Teil der Simulation ist, wird der Luftstrahl auf der Grundlage der experimentellen Daten und der vorherrschenden Randbedingungen beschrieben. Er ist in seiner Zusammensetzung identisch mit der kontinuierlichen Phase und wird als Einlass direkt in der Düsenmitte spezifiziert, wie in Abbildung 24 gezeigt. Der Strahl erhält einen Winkel, der dem Gesamtspraywinkel aus den experimentellen Untersuchungen (Shadowgraphie) entspricht. Anders als in der realen Geometrie ist der Einlass als durchgehende Kreisfläche gestaltet. Die Geschwindigkeit am Einlass erfüllt die Kontinuität, die sich aus der Düsengeometrie und dem Betriebspunkt ergibt. Die disperse Phase wird nach 10 mm über einen konischen Injektor eingeführt. Wie die experimentellen Daten (SIV-Messungen) zeigen, ist das Geschwindigkeitsprofil zu diesem Zeitpunkt voll entwickelt. Die gemessene Maximalgeschwindigkeit dient als Anfangsgeschwindigkeit. Der Winkel des Injektorkegels entspricht ebenfalls dem gemessenen Gesamtspraywinkel und die Tropfenverteilung entspricht der Rosin-Rammler-Verteilung, die anhand der PDA-Messungen in der Messebene mit dem geringsten Abstand zur Düse (15 mm/35 mm) ermittelt wurde.

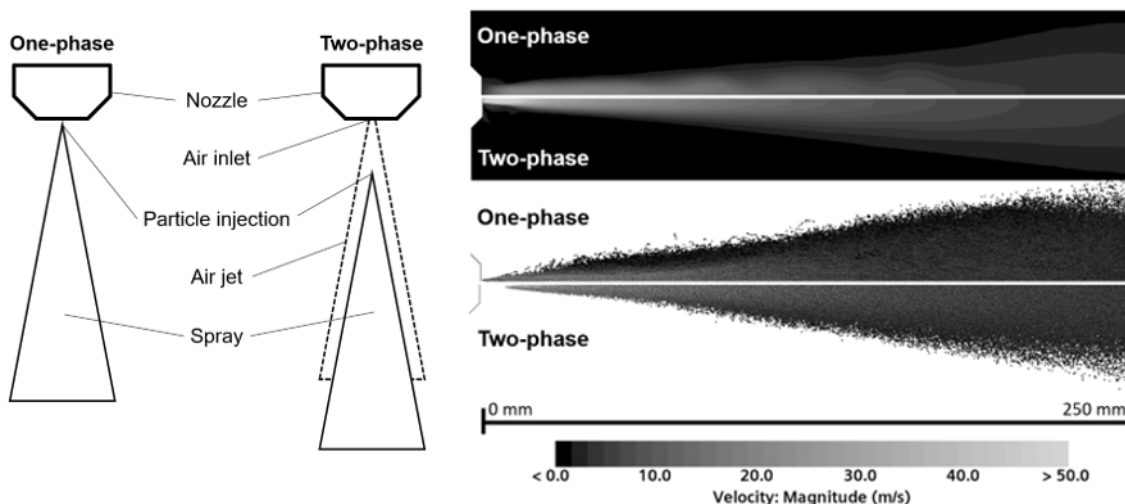


Abbildung 24: Übersicht zur Implementierung des einphasigen und zweiphasigen Ansatzes (links) und qualitativer Vergleich der zwei Simulationsansätze (rechts)

Wie erwartet und in Abbildung 24 dargestellt, führt der Hintergrundluftstrahl des Zweiphasen-Ansatzes un der derjenige induziert durch die Tropfengeschwindigkeit des einphasigen Ansatzes zu einer Kernströmung mit einem deutlichen Geschwindigkeitsmaximum in der Mitte, welche aus dem Luftenlass austritt. Sie schwächt sich mit zunehmendem Abstand von der Düse so weit ab, dass sich ein nahezu homogenes Geschwindigkeitsprofil ausbildet. Charakteristische Eigenschaften liegen auch für die disperse Phase vor. Ab

dem Einspritzpunkt bildet sich ein Bereich aus, in dem sich die Einlaufeigenschaften (Spraygeschwindigkeit, Spraywinkel) mit der kontinuierlichen Phase überlagern, so dass sich die Form des Sprays ausbilden kann. Auf den von der Injektion dominierten Bereich folgt ein von der Luftströmung dominierter Bereich. Die Tröpfchen folgen hauptsächlich der Kernströmung des Luftstroms. Form und Geschwindigkeit des Spraynebels werden durch die Luftströmung bestimmt. Das Ausmaß der Wechselwirkung zwischen dem Spray und dem Luftstrom ist stark von den Betriebsbedingungen abhängig.

Abbildung 25 zeigt exemplarisch für den OP1 die mittlere Rosin-Rammler-Tropfengrößenverteilung sowie die entsprechenden Geschwindigkeitsprofile in den Messebenen von 100 mm (oben) und 200 mm (unten) aus der Simulation zusammen mit den experimentellen Daten. Die Geschwindigkeitsprofile sind mit approximierten Polynomkurven zweiter Ordnung erweitert. Sowohl die breite des Sprays als auch das Geschwindigkeitsniveau stimmt gut mit den experimentellen Daten überein. Mit steigendem Abstand nimmt die Ähnlichkeit der Rosin-Rammler-Verteilungen ab.

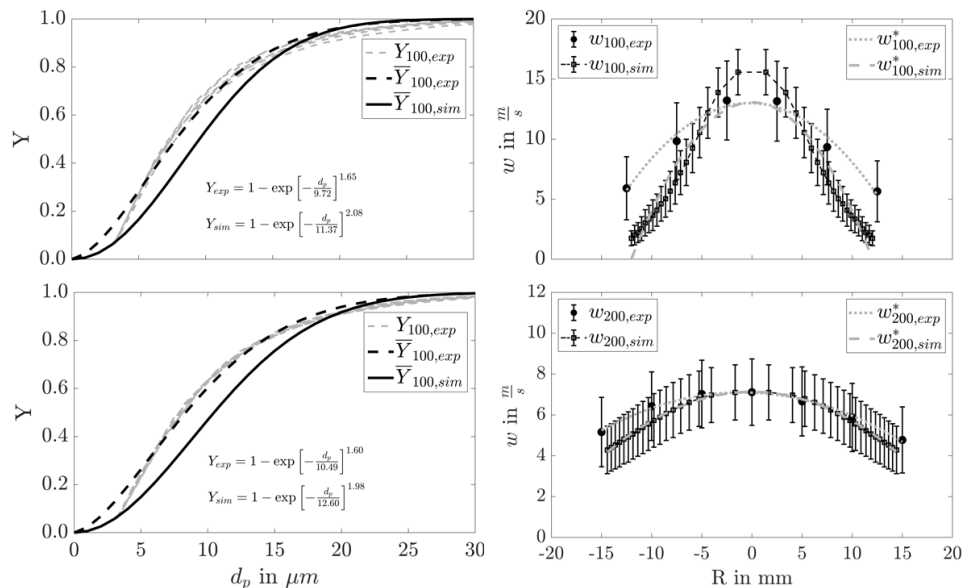


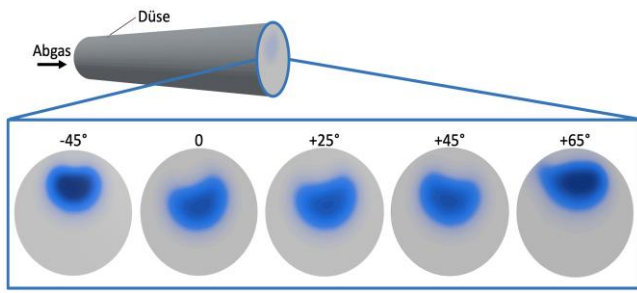
Abbildung 25: Vergleich zwischen Simulation und experimentellen Daten der Tropfengrößenverteilung und des Geschwindigkeitsprofils bei 100 mm (oben) und 200 mm (unten) Düsenabstand für OP1

AP 2.4 Designstudie

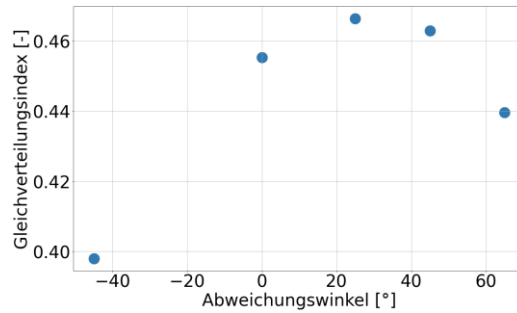
Ziel dieses Arbeitspakets ist es, die am besten geeignete Düsenneigung zu untersuchen, die zu einer homogeneren Tröpfchengrößenverteilung und folglich zu einer besseren Durchmischung zwischen dem Spray und dem Abgasquerstrom führt. Der in AP 2.3 beschriebene numerische Ein-Fluid-Ansatz wird verwendet, um eine erste digitale Entwurfsanalyse durchzuführen. Um zu entscheiden, ob eine automatisierte Multiparameter-Optimierungsstudie erforderlich ist, wird zunächst eine erste Studie mit verschiedenen Neigungswinkeln durchgeführt. Wie in Abbildung 26 zu sehen ist, wurden fünf verschiedene Düsenwinkel untersucht. Der Neigungswinkel von null Grad entspricht der ursprünglichen Düsenneigung, die bei den Versuchen im Rahmen dieses Projekts verwendet wurde. Die negative Neigung bedeutet, dass die Einspritzrichtung der Düse mit der Abgasströmungsrichtung ausgerichtet ist. Die positive Neigung bedeutet, dass das Spray entgegen der Abgasströmungsrichtung eingespritzt wird. Der gemessene Spraywinkel und die Tröpfchengrößenverteilung von Betriebspunkt 8 werden für die Designstudie verwendet.

Die Verteilung des eingespritzten Stoffes wurde durch den Abweichungswinkel beeinflusst. Zur Visualisierung der Massenanteilsverteilung ist in Abbildung 26.a die Querschnittsfläche des Abgasrohres in Abhängigkeit vom Abweichungswinkel dargestellt. Der Betriebspunkt 8 wurde für alle untersuchten Abweichungswinkel verwendet.

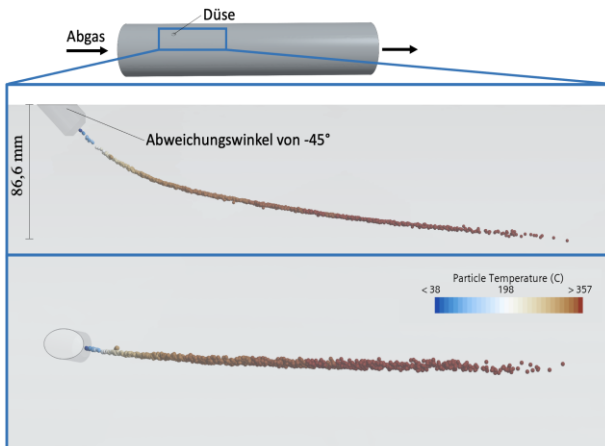
Die grafische Analyse zeigt durch die Farbenintensität, dass das Wasser in denbeiden extremen Fällen (-45° und 65°) nur begrenzt verteilt ist. Außerdem konzentriert sich das Wasser hauptsächlich an der oberen Wand des Abgasrohres. Diese Beobachtung entspricht den vorherigen Erwartungen, da mit zunehmender Abweichung des Einspritzwinkels die Einspritzung näher an der Rohrwand erfolgt. Im Gegensatz dazu wird bei Abweichungswinkeln von 0°, 25° und 45° eine gleichmäßigere Verteilung des Wassers beobachtet. Diese Verteilung wird quantitativ durch den Gleichverteilungsindex in Abbildung 26.b bestätigt.



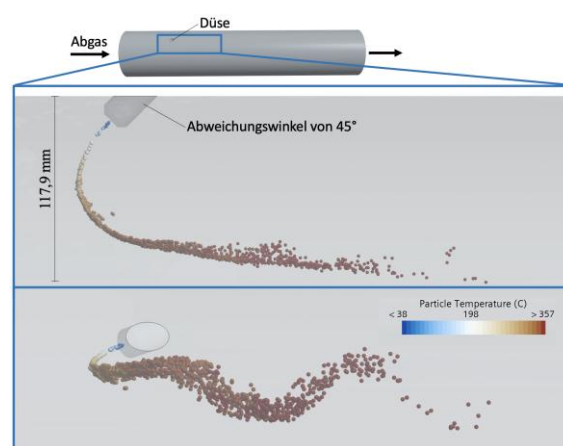
(a)



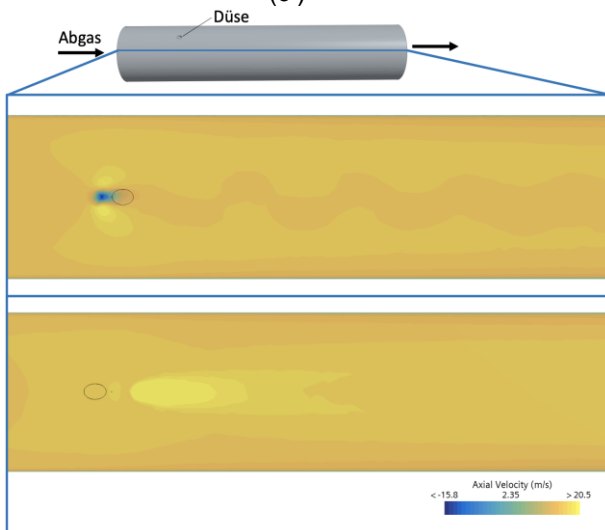
(b)



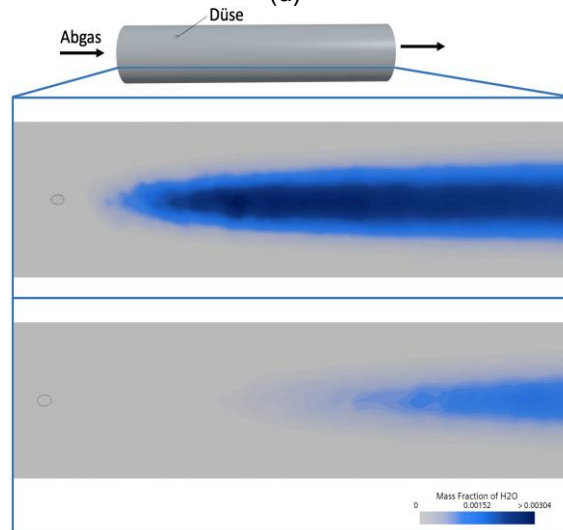
(c)



(d)



(e)



(f)

Abbildung 26: Wasserverteilung am Ende des Abgasrohres in Abhängigkeit vom Abweichungswinkel (a), Gleichverteilungsindex in Abhängigkeit vom Abweichungswinkel. (b) Vorderansicht des eingespritzten Wassers und die Eindringtiefe (oben). Draufsicht des eingespritzten Wassers (unten). (c), Vorderansicht des eingespritzten Wassers und die Eindringtiefe (oben). Draufsicht des eingespritzten Wassers (unten) (d), Draufsicht der axialen Abgasgeschwindigkeit bei einem Abweichungswinkel von 45° (oben). Draufsicht der axialen Abgasgeschwindigkeit bei einem Abweichungswinkel von -45° (unten). 2mm unterhalb der Düse (e), Draufsicht der Wasserverteilung bei einem Abweichungswinkel von 45° (oben). Draufsicht der Wasserverteilung bei einem Abweichungswinkel von -45°(unten). 140mm unterhalb der Düse (f).

Die Einspritzung entgegen der Strömungsrichtung bei einem Abweichungswinkel von 25° führte zu dem höchsten Gleichverteilungsindex mit 46,50%. Dies entspricht einer Verbesserung des Gleichverteilungsindex um lediglich 1,27 Prozentpunkte. Da ein modifizierter Einspritzwinkel den Gleichverteilungsindex um maximal 6,28 Prozentpunkte veränderte, bleibt die senkrecht zur Strömungsrichtung orientierte Ausgangsposition der Düse eine sinnvolle Alternative. Die Variation des Gleichverteilungsindex durch den Einspritzwinkel ist auf das resultierende Strömungsverhalten zurückzuführen. Bei einem Abweichungswinkel von -45° werden die Tropfen vom Abgas sofort mitgetragen. Dieses Verhalten ist in Abbildung 26.c deutlich erkennbar.

Entgegen der Strömungsrichtung, wie bei einem Abweichungswinkel von 45° , erfolgt ein intensiverer Impulsaustausch zwischen den Tropfen und der Gasphase. Dies führt zu einer verstärkten Tropfenausbreitung. In diesem Fall dringen die Tropfen tiefer in das Abgas ein. Dies wird durch den Vergleich der Eindringtiefe in den Abbildung 26.c und 26.d bestätigt.

Ein positiver Abweichungswinkel führte zu einem ähnlichen Phänomen wie bei der Umströmung einer Kugel. Dies liegt daran, dass das Spray ein Hindernis für die Gasphase darstellte. Dadurch waren die axialen Geschwindigkeiten in unmittelbarer Nähe der Düse negativ, was zur Ablenkung der Abgasströmung und zur Bildung eines turbulenten Nachlaufs führte. Bei einem negativen Abweichungswinkel konnte die Gasphase hingegen ungehindert strömen. Zur Veranschaulichung dieses Phänomens sind die axialen Geschwindigkeiten auf einer Längsschnittfläche des Rohres bei Abweichungswinkeln von 45° und -45° in Abbildung 26.e dargestellt.

Die Eindringtiefe und der turbulente Nachlauf beeinflussen die Tropfenverdunstung und -ausbreitung. Das verdunstete Wasser erreichte die Achse des Abgasrohres bereits 82 mm stromabwärts der Düse, wodurch der Gleichverteilungsindex minimal erhöht wurde. Bei einem Abweichungswinkel von -45° wurde das Wasser erst 327 mm stromabwärts der Düse nachgewiesen (siehe Abbildung 26.f).

Die Designstudie zeigte, dass die negative Neigung (Spraystrahl wird mit der Abgasströmungsrichtung ausgerichtet) die schlechteste Tröpfchenverteilung ergab, die durch die Oberflächengleichmäßigkeit des Wassers im Abgas gemessen wird. Eine positive Neigung der Düse, bei der das Spray entgegen der Strömungsrichtung des Abgases eingespritzt wird, führte jedoch zu einer maximalen Verbesserung von 4,25 %. In Anbetracht der geringen Auswirkung der Düsenneigung auf die Verteilung der Tröpfchen wurde jedoch der Schluss gezogen, dass die ursprüngliche Düsenkonfiguration weiterhin für alle experimentellen und numerischen Arbeitspakete dieses Projekts verwendet werden soll.

Arbeitspaket 3: Tropfenverdampfung

AP 3.1 Simulation Verdampfungslänge

Im Rahmen des Arbeitspakets ist es das Ziel auf Basis einer Zweistoff-Datenbank die Harnstoff-Wasser-Lösung als Mischung zweier Flüssigkeiten darzustellen. Darüber hinaus soll die Verdampfungscharakteristik einer Harnstoff-Wasser-Lösung nachgebildet werden und die Verdampfungslängen im heißen Abgas ermittelt werden. Der kristalline Harnstoff ist in Wasser gelöst. In der kommerziell erhältlichen Form AdBlue® beträgt der Harnstoffanteil 32,5 %_{wt}. Hiermit einher geht ein großer Lösungsbereich (siehe Abbildung 27), der bis zu einer unteren Temperatur von ca. 262 K stabil ist (BASF [5]).

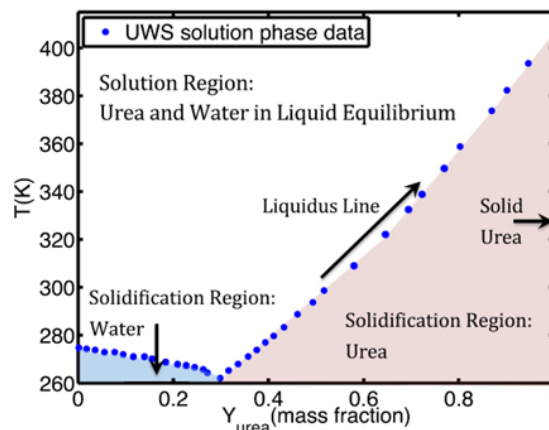


Abbildung 27: Lösungsbereich von Harnstoff-Wasser-Lösung in Abhängigkeit der Harnstoffkonzentration und Temperatur der Lösung ((Ryddner & Trujillo [6]) aus (Egal [7]))

Die Stoffeigenschaften von AdBlue® sind weitestgehend gut in der Literatur beschrieben. Im Abgas verändert sich jedoch das Gemisch bis zur rückstandslosen Verdunstung der tropfen. Zunächst verdunstet das Wasser (Wang, et al., [8]), bis nur noch Harnstoff vorliegt, welcher ab 407 K schmilzt, (Yaws [9]), und ebenfalls verdunstet. Aus Abbildung 27 wird ersichtlich, dass die Lösung den rein flüssigen Zustand auch bei höherer Temperatur mit zunehmender Harnstoffkonzentration verlässt. Für die computergestützte Abbildung der Lösung wird sie vereinfacht als scheinbare Flüssigkeit angenommen. Daraus folgt, dass die Lösung stets flüssig ist und aus zwei flüssigen Komponenten besteht. Die Stoffdaten der Reinstoffe sind der zugänglichen Literatur entnommen und wurden in Bezug auf Realdaten modifiziert. Quellen und die zugehörige Mischregel sind in Tabelle 7 angegeben.

Tabelle 2: Bezugsquellen für die Stoffeigenschaften von Wasser und Harnstoff sowie angewandte Mischregeln der Komponenten

Stoffeigenschaft	Mischgesetz (Siemens, 2023)	Wasser	Harnstoff
Dichte	$\phi_{mix} = \frac{1}{\sum \left(\frac{y_i}{\phi_i}\right)}$	(VDI (GVC) [10])	(BASF [5]), (Haynes [11])
Verdampfungsenthalpie		(VDI (GVC) [10])	(Yaws [9])
Spez. Wärmekapazität	$\phi_{mix} = \sum y_i \cdot \phi_i$	(VDI (GVC) [10])	(BASF [5]), (Yaws [9])
Dampfdruck	$x_i \cdot p = y_i \cdot p_i^{LV}$	(VDI (GVC) [10])	(Bernhard [12])
Wärmeleitfähigkeit	$\phi_{mix} = \frac{1}{2} \cdot \left[\sum y_i \cdot \phi_i + \left(\sum \frac{y_i}{\phi_i} \right)^{-1} \right]$	(VDI (GVC) [10])	(BASF [5]), (Yaws [9])
Viskosität	$\phi_{mix} = \sum y_i \cdot \phi_i$	(VDI (GVC) [10])	(BASF [5]), (Yaws [9])
Oberflächenspannung	$\phi_{mix} = \sum y_i \cdot \phi_i$	(Yaws [9])	(Agarwal [13])

Die Thermolyse-Reaktion kann, wie von Birkhold [14] und Fischer [15] angegeben, bereits dem Verdunstungsprozess zugeordnet werden. Aufgrund des stationären Hochtemperaturbetriebs der BHKW-Motoren wird die Hydrolyse-Reaktion instantan ausgeführt. Demnach wird verdunstender Harnstoff direkt zum Reduktionsmittel Ammoniak und Kohlendioxid gewandelt.

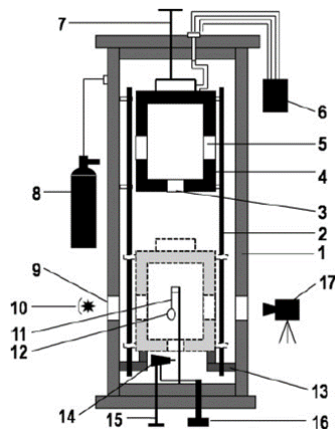


Abbildung 28: Experimenteller Aufbau zur Ermittlung der Verdampfungscharakteristik von Harnstoff-Wasser-Lösung

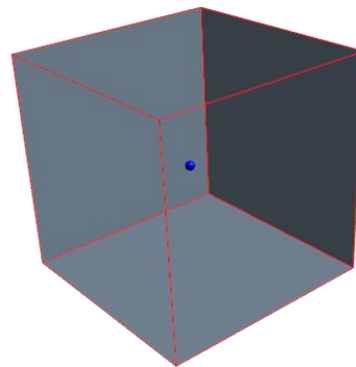


Abbildung 29: Aufbau der Simulation zur Ermittlung der Verdampfungscharakteristik von Harnstoff-Wasser-Lösung

Für die Beschreibung der HWL-Lösung im Kontext ihrer Anwendung, also der Verdunstung bei Temperaturen im Bereich des Abgasniveaus, stehen als Validierungsmöglichkeiten aus der Literatur mitunter Experimente zur Verfügung. So hat zum Beispiel Wang, et al. [8] zu verschiedenen Temperaturniveaus einzelne HWL-Tropfen hinsichtlich ihres Verdunstungsverhaltens experimentell, wie in Abbildung 28: Experimenteller Aufbau zur Ermittlung der Verdampfungscharakteristik von Harnstoff-Wasser-Lösung dargestellt, untersucht. An einer Kapillaren wurden Tropfen erzeugt, die in einer fahrbaren Kapsel und möglichst gleichbleibenden Randbedingungen verdunstet. Die Veränderung des Tropfens wurde mit Hilfe einer Kamera aufgenommen. Fischer [15] hat die Erkenntnisse mit anderen Quellen zu experimentellen und simulativen Daten zusammengetragen und daraus die charakteristische Verdunstungszeit für Wasser und Harnstoff extrahiert. Für den Vergleich wurden die Randbedingungen von Wang, et al. [8] simulativ, wie in Abbildung 29: Aufbau der Simulation zur Ermittlung der Verdampfungscharakteristik von Harnstoff-Wasser-Lösung angegeben, nachgestellt. Jedoch ist ein fester initialer Durchmesser verwendet worden. Die Ergebnisse sind in Abbildung 30: Zeitliche Änderung des quadrierten Tropfendurchmessers D normiert auf den quadrierten Startdurchmesser D_i als Durchmesser-Abnahme über die Zeit aufgetragen. Beide Achsen sind auf das Quadrat des Initialdurchmessers normiert. Wie auch in der Literatur beschrieben, lässt sich deutlich erkennen, dass zunächst Wasser verdunstet und anschließend der Harnstoff mit seinem höheren Dampfdruck zu einer geringeren Abnahmerate des Tropfendurchmessers führt. Mit steigender Temperatur nimmt die Verdunstungsrate zu und der Tropfendurchmesser nimmt schneller ab.

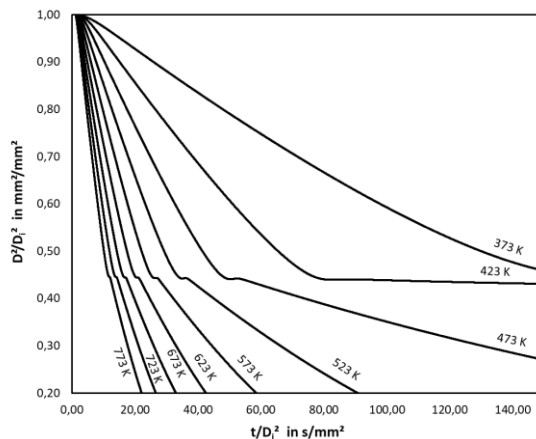


Abbildung 30: Zeitliche Änderung des quadrierten Tropfendurchmessers D normiert auf den quadrierten Startdurchmesser D_i

Wie von Fischer [15] zusammengefasst, setzt Abbildung 31 die Ergebnisse zu den Verdampfungsraten aus dieser Arbeit ins Verhältnis zu bereits existierenden Literaturdaten. Die Daten beziehen sich sowohl auf Experimente als auch auf Simulationen. Insbesondere für Wasser stimmen die Simulationsdaten dieser Arbeit mit den experimentellen Daten von Wang und Simulationsdaten anderer Autoren überein. Für Harnstoff lässt sich mit steigender Temperatur eine größer werdende Abweichung ausmachen, wobei zu weiteren Simulationsdaten eine grundsätzliche Übereinstimmung besteht. Die Abweichung ist bereits vielfach in der Literatur diskutierten Phänomen zuzuordnen, wie Harnstoff-Krustenbildung, starke Tropfenformänderungen, Energieeintrag durch die Tropfenkapillare, Messungenauigkeit sowie Vernachlässigung der eigentlichen Tropfenform, Konzentrations- und Temperaturprofile im Tropfen, Eigenkonvektion und den bereits benannten Vereinfachungen in der Simulation.

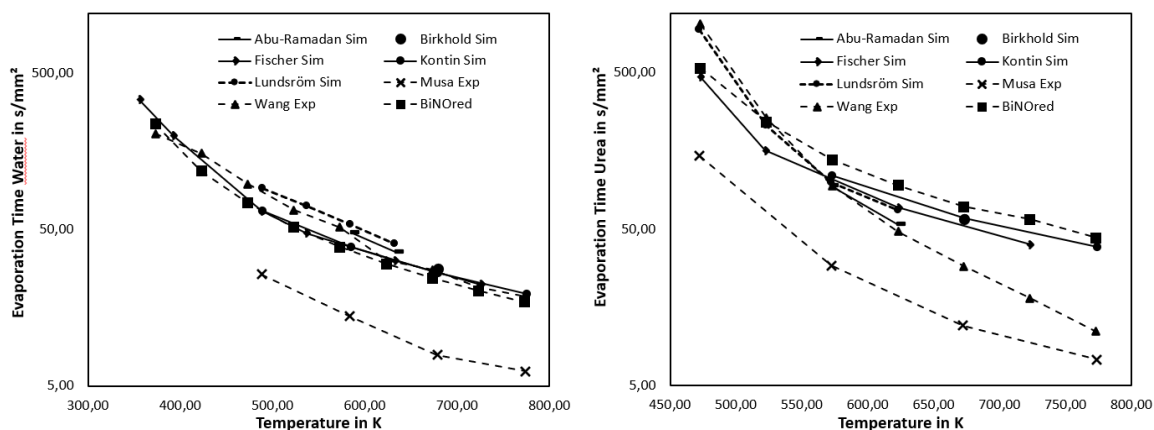


Abbildung 31: Verdampfungsraten von Wasser (links) und Harnstoff (rechts) für verschiedene Temperaturen (Fischer [15])

Darüber hinaus werden die Verdampfungseigenschaften der Harnstoff-Wasser-Lösung als Teil des integrierten numerischen Arbeitsablaufs simuliert. Die Verdunstungslänge im heißen Abgas wird bestimmt und anhand der experimentellen Ergebnisse aus AP 3.2 validiert.

Zur Validierung des Modellierungsansatzes für die Tröpfchenverdampfung und zur Bewertung der Zuverlässigkeit des digitalen Zwillings wurde die simulierte Sprayverdampfungslänge mit den experimentellen Daten aus Arbeitspaket 3.2 verglichen. Unter den verfügbaren Betriebsbedingungen wurde der Betriebspunkt 8 als Referenzfall ausgewählt, da er für praktische Motorszenarien relevant ist. Er ist definiert durch einen Luftmassenstrom von 15 l/min, eine Harnstoff-Dosierate von 1,5 kg/h und eine Strömungsgeschwindigkeit von 12 m/s. Diese Randbedingungen wurden in der Simulation angewendet, um den Versuchsaufbau so genau wie möglich nachzubilden.

Als Teil des Arbeitspakets 3.1 führte ich numerische Simulationen mit STAR-CCM+ durch, um das Verdunstungsverhalten der Sprays in einer heißen Abgasumgebung zu untersuchen. Die von Emissions Partner bereitgestellten thermodynamischen Daten wurden als Input für die Modellierung verwendet. Es wurden drei Abgastemperaturen untersucht: 400 °C, 450 °C und 500 °C.

Die Simulationsergebnisse zeigen eine deutliche Temperaturabhängigkeit des Verdampfungsprozesses. Bei 500 °C verdunstet das Spray schnell, wobei die Verdampfungslänge auf unter 100 mm sinkt - was den experimentellen Beobachtungen sehr nahe kommt. Im Gegensatz dazu erstreckt sich die Verdampfungslänge bei 400 °C und 450 °C auf etwa 300 mm, was auf einen langsameren Verdampfungsprozess aufgrund geringerer thermischer Energie und niedrigerer Tröpfchenfragmentierungsraten zurückzuführen ist.

Geringfügige Diskrepanzen zwischen den Simulationen und den experimentellen Daten sind in erster Linie auf Einschränkungen bei der Präzision der optischen Messungen und der Nachbearbeitung der Bilddaten zurückzuführen. Darüber hinaus berücksichtigt das numerische Modell Tröpfchen mit extrem kleinen Durchmessern, was die Interpretation des Zeitpunkts der vollständigen Verdunstung leicht verfälschen kann.

Zur Unterstützung der Auswertung wurden Konturdiagramme der Tröpfchenkonzentration (Abbildung 33) für alle Temperaturfälle erstellt. Darüber hinaus wurden Histogramme (Abbildung 32) erstellt, um die räumliche Wahrscheinlichkeitsverteilung des Vorhandenseins von Tröpfchen in unterschiedlichen Abständen von der Düse zu veranschaulichen. Diese visuellen Hilfsmittel bieten einen tieferen Einblick in die räumliche Dynamik des Sprayverhaltens unter verschiedenen thermischen Bedingungen und dienen als Grundlage für die Validierung der Genauigkeit der in den Simulationen vorhergesagten Verdunstungslänge.

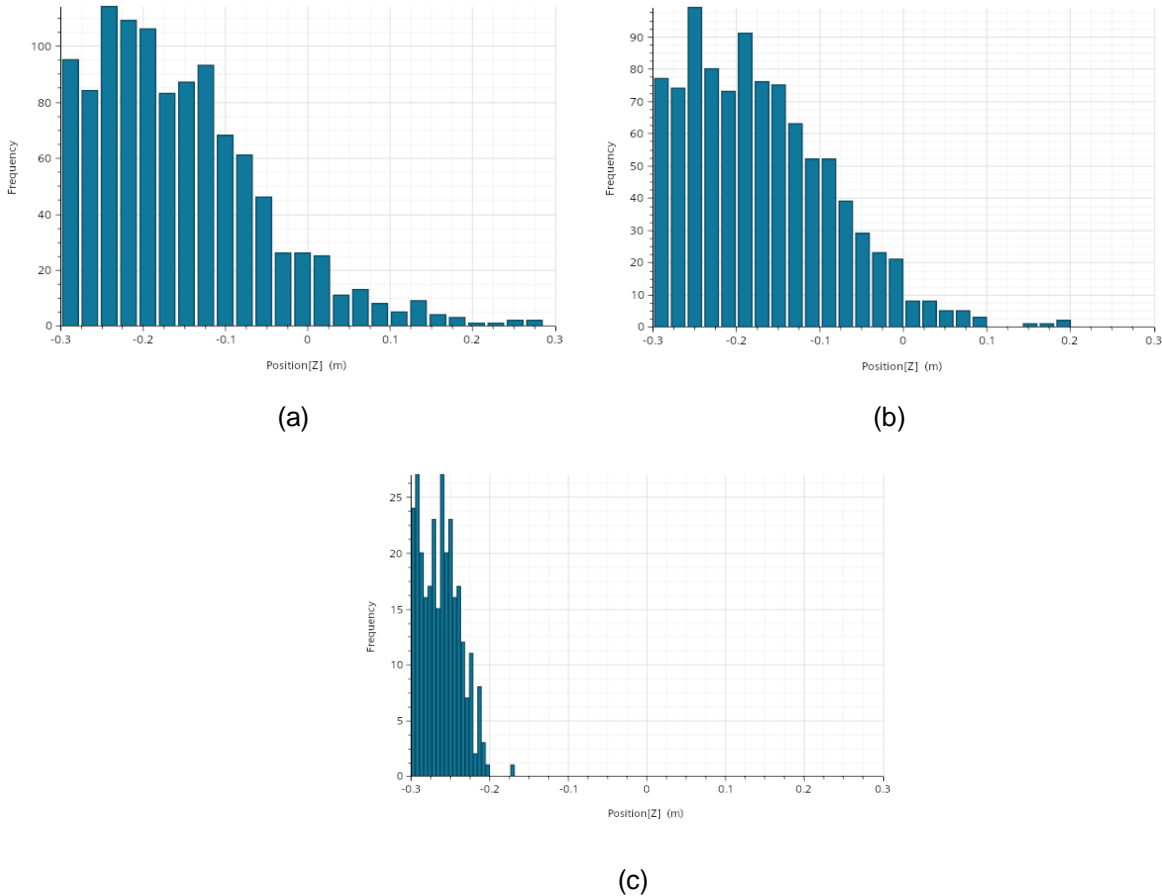
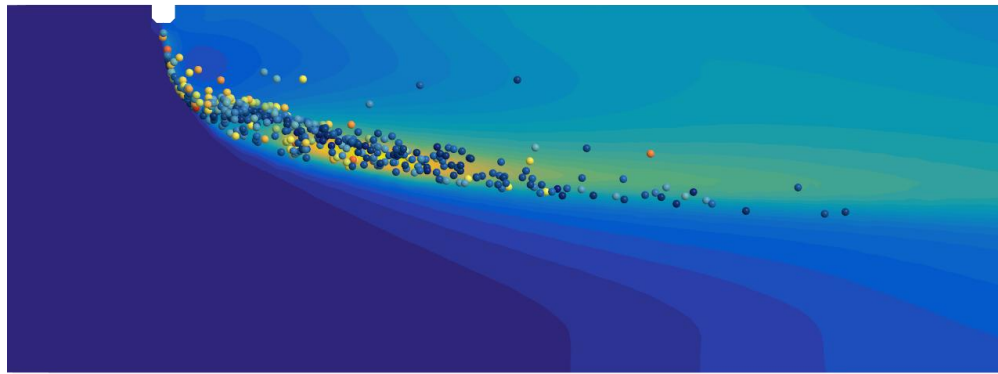
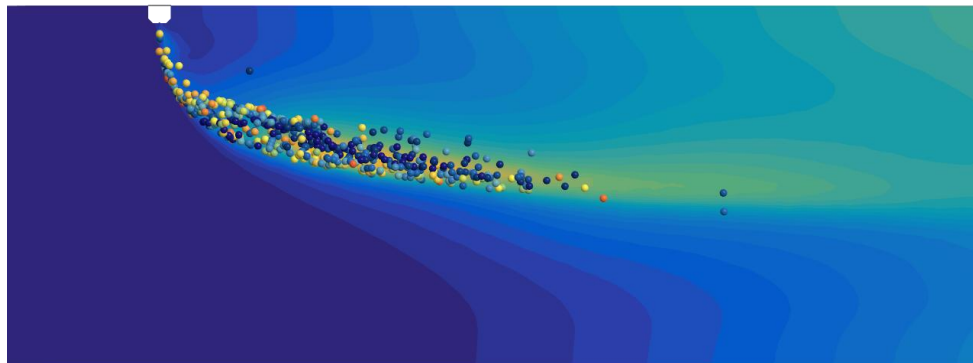


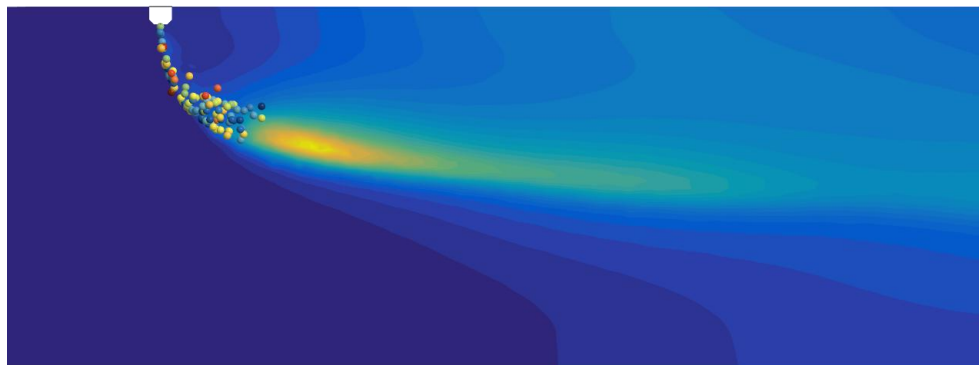
Abbildung 32: Histogramme, die die axiale Positionsverteilung der in den heißen Abgasstrom eingespritzten Spraytropfen bei drei verschiedenen Gasttemperaturen zeigen: (a) 400 °C, (b) 450 °C, und (c) 500 °C. Die Position wird entlang der Z-Achse gemessen, wobei negative Werte stromaufwärts liegende Positionen relativ zur Position der Düse anzeigen. Mit steigender Temperatur verschiebt sich die Tröpfchenverteilung, was auf eine verstärkte Verdampfung und ein verändertes Eindringverhalten hindeutet.



(a)



(b)



(c)



Abbildung 33: Momentane Konturdiagramme, die die Verteilung der Tröpfchen in einem heißen Abgasstrom bei drei verschiedenen Umgebungstemperaturen zeigen: (a) 400 °C, (b) 450 °C, und (c) 500 °C. Die Hintergrundkontur stellt den Massenanteil von NH_3 dar, während die überlagerten Tröpfchen zur Veranschaulichung nach ihrem Durchmesser farbkodiert sind. Tröpfchen mit einem Durchmesser nahe Null zeigen an, dass die Verdampfung aktiv ist. Mit steigender Temperatur werden eine schnellere Verdunstung und eine kürzere Lebensdauer der Tröpfchen beobachtet.

AP 3.2 Messung Verdampfungslänge

Zur Messung der Verdampfungslänge wurde ein Laserlichtschnitt über ein Laserendoskop so in die Heißgasstrecke eingebracht, dass sich der Lichtschnitt von der Kanaloberseite aus in Strömungsrichtung nach schräg unten ausbreitet und dabei gleichzeitig die Sprayachse schneidet. Dazu musste das Endoskop mit einem entsprechenden Winkel zur Kanalachse integriert werden. Der Winkel wurde so gewählt, dass ein Großteil des Sichtbereichs (welcher über die optischen Zugänge definiert ist) ausgeleuchtet wird. Tropfen, die sich innerhalb des Lichtschnitts befinden, streuen das einfallende Licht auf Basis der Mie-Streuung. Ein Teil des Streulichts wird rechtwinklig zum Lichtschnitt von einer Kamera erfasst, wobei das resultierende Signal abhängig vom Tropfendurchmesser und der Tropfenanzahl ist. Die Distanz zur Düse ab der kein Signal mehr erfasst werden kann, entspricht damit der Verdampfungslänge. Zum besseren Verständnis des Messverfahrens ist in eine Prinzipskizze dargestellt.

Die Verarbeitung der aufgenommenen Bilder erfolgte grundsätzlich über drei signifikante Prozessschritte. Das jeweilige Ergebnis eines Prozessschrittes ist beispielhaft in Abbildung 35 dargestellt. Teil a) zeigt dazu ein einzelnes, unverändertes Rohbild. Teil b) zeigt das kontrastverbesserte Einzelbild. Die Kontrastverbesserung wurde hier grundlegend durch die Kombination von zwei Funktionen in MATLAB erreicht.

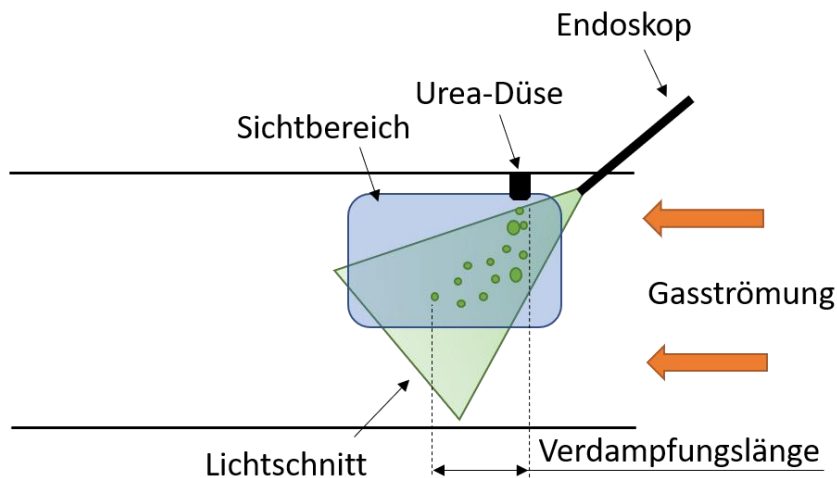


Abbildung 34: Prinzipskizze zur Messung der Verdampfungslänge

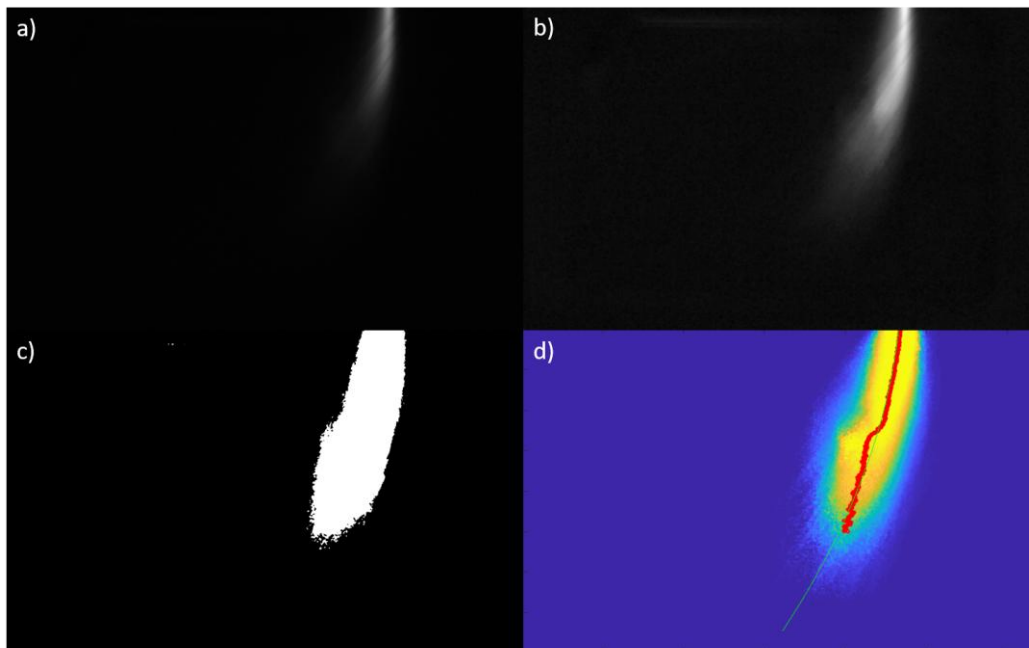


Abbildung 35: Prozessschritte in der Bildauswertung: a) Rohbild, b) Bild nach Kontrastverbesserung, c) Bild nach Binarisierung, d) Aufenthaltswahrscheinlichkeit-Bild mit gefittetem Sprayverlauf

Im ersten Schritt wurde die Funktion „imdiffusefilt“ angewendet, wodurch eine Glättung zur Rauschreduzierung erzielt wird, wobei aber Kanten oder andere signifikante Bildelemente erhalten bleiben. Anschließend wurde die Funktion „adapthisteq“ angewendet, wodurch eine adaptive Vergleichmäßigung lokaler Grauwerte ausgeführt wurde. Als Ergebnis ergibt sich ein Spray mit realistischer Ausprägung bei gleichzeitiger Ausnutzung der möglichen Helligkeitsverteilung. In Abbildung Teil c) ist das binarisierte Spray dargestellt. Hier wird in die Bereiche „Spray“ und „Kein Spray“ unterschieden. Teil d) zeigt eine quantitative Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Sprays in Folge der Aufsummierung aller binarisierten Bilder pro Betriebspunkt. Zusätzlich wird ein Sprayverlauf (grüne Kurve) anhand der maximalen Intensitäten (rote Punkte) pro Zeile erzeugt.

Abbildung 36 zeigt den Sprayverlauf für verschiedene Betriebspunkte. Dabei wird insbesondere ersichtlich, dass der Sprayverlauf auch durch die Höhe des Urea-Durchsatzes beeinflusst wird. Mehr eingedünte Flüssigmasse bedeutet tendenziell größere Tropfen, was einen größeren Impuls und hat eine geringere Intensität bzgl. Ablenkung durch die Abgasströmung zur Folge hat. Weiterhin zeigt sich, dass die Sprays bei erhöhter Temperatur eine zunächst stärkeres Eindringvermögen aufweisen. Dies auf die Verringerung der Abgasdichte zurückzuführen.

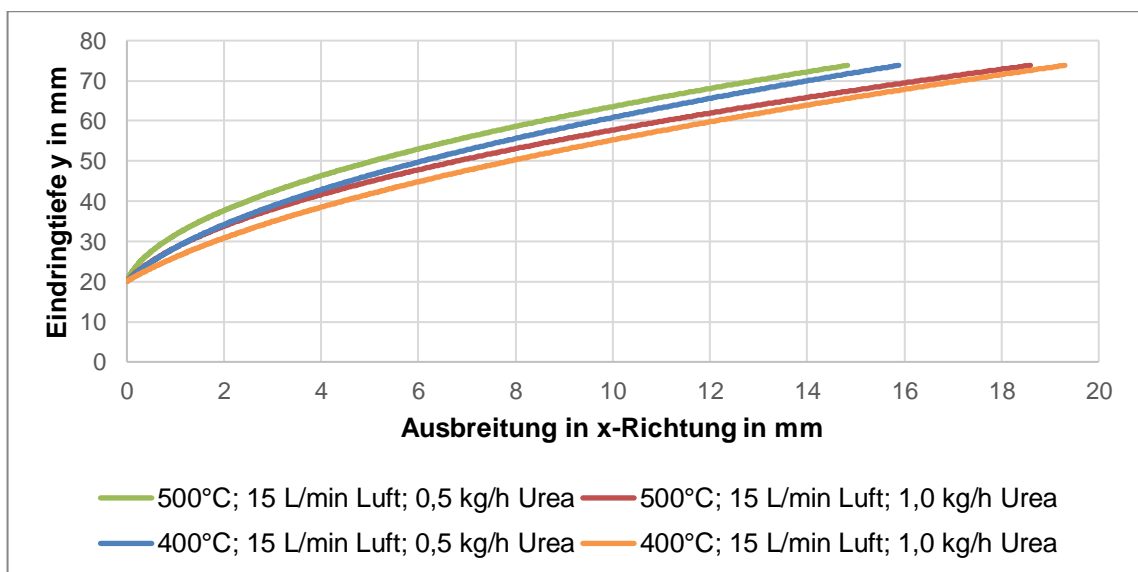


Abbildung 36: Spraykennlinien definiert durch Ausbreitung in Richtung der Gasströmung und Eindringtiefe

Analog dazu zeigt Abbildung 37 die Spraybreite über der Eindringtiefe für die gleiche Betriebspunkte. Hier zeigt sich, dass für die Punkte mit geringerer Temperatur die Spraybreite ab einer Eindringtiefe von rund 50 mm schneller abnimmt als für die Punkte mit höherer Temperatur. Dies ist ebenfalls auf die Dichteunterschiede zwischen den Betriebspunkten zurückzuführen und ist somit stimmig zu den Erkenntnissen aus Abbildung 36.

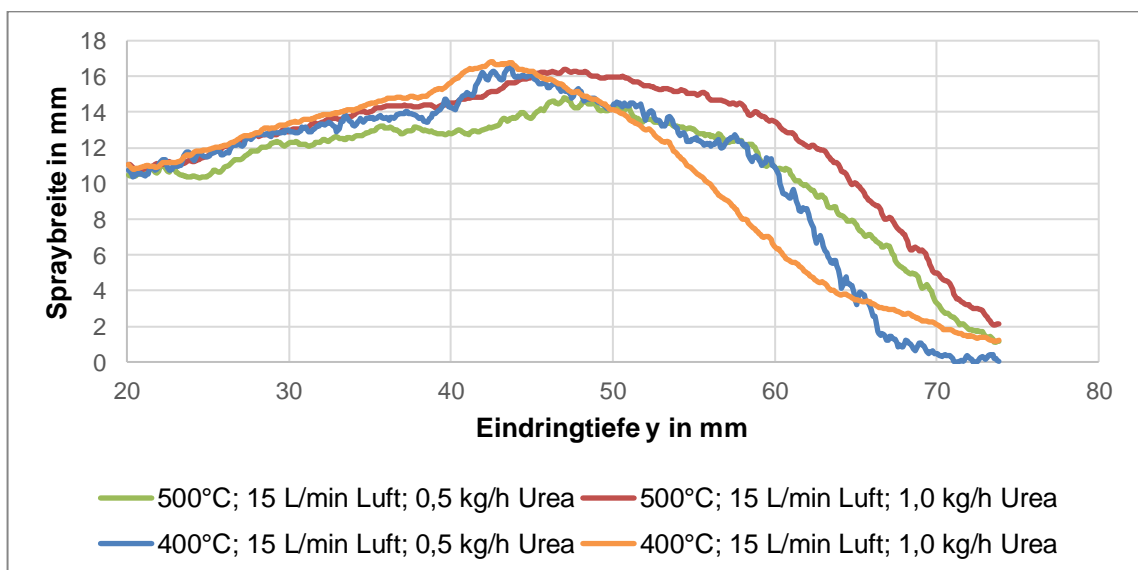


Abbildung 37: Spraybreite über Eindringtiefe

Arbeitspaket 4: Wandinteraktion

AP 4.1 Charakterisierung Tropfen-Wand-Kontakt und Filmbildung

Da innerhalb der DN 300 Mischstrecke keine Tropfen-Wand-Interaktion auftritt und die Anfertigung einer weiteren Mischstrecke sowohl das zeitliche als auch das finanzielle Budget überreizt hätte, konnte diese unter den vorgesehenen Bedingungen nicht gemessen werden. In der Vorplanung des Projektes war von einer deutlich langsameren Verdampfung ausgegangen, die experimentell viel schneller gefunden wurde. Das Thema der Tropfen-Wand-Interaktion ist somit viel geringer als in der Vorplanung angenommen wurde.

AP 4.3 Simulation Wandinteraktion

Ziel dieses Arbeitspaketes ist es, die Wechselwirkung zwischen den Tropfen und den Rohrwänden und dem Mischer des DN 300 numerisch zu analysieren. Wie in den im Rahmen dieses Projekts durchgeführten Experimenten und Simulationen beobachtet wurde, verdampft der Spraynebel schnell, was eine Wand-Tropfen-Wechselwirkung ausschließt. Die Einführung der Metallplatte in der Nähe des Düsenbereichs macht es jedoch erforderlich, den Einfluss des Hindernisses auf den Spraynebel und die Möglichkeit einer Tröpfchen-Wand-Wechselwirkung zu untersuchen.

In Abbildung 38 ist die Position der Metallplatte in der Nähe der Düse dargestellt. Der in den vorangegangenen Arbeitspaketen entwickelte numerische Ansatz wurde integriert und angewandt. Die Simulationsergebnisse zeigten, dass die Tröpfchen der Harnstoff-Wasser-Lösung schnell verdampften und aufgrund der Strömungsmuster die Platte nicht erreichten. In Anbetracht der fehlenden Wechselwirkung zwischen Tröpfchen und Wand bei der Filmbildung in der untersuchten Geometrie wurde die Untersuchung nicht weitergeführt.

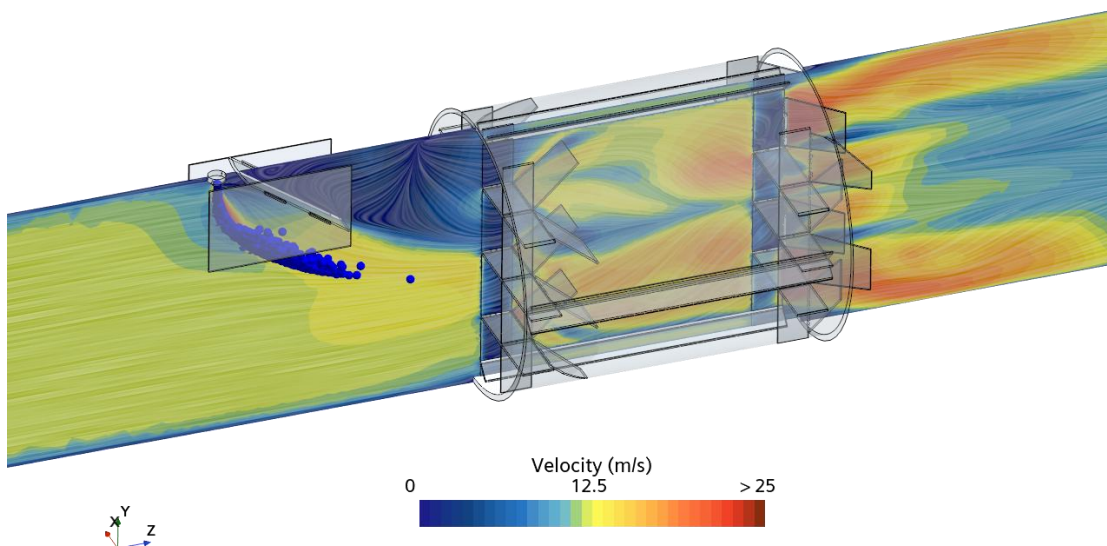


Abbildung 38: Darstellung des Strömungsmusters, das durch die Wechselwirkung zwischen dem Spray und dem Querstrom des Abgases in der DN300-Rohrkonfiguration mit dem Mischer und der Metallplatte in der Nähe der Düse entsteht

Arbeitspaket 5: Ammoniakverteilung

AP 5.1 Messungen Ammoniakgleichverteilung

Die Messungen zur Ammoniakgleichverteilung wurden mittels FTIR-Spektroskopie durchgeführt und abgeschlossen. Es wurde eine Vielzahl an Betriebspunkten mit verschiedenen Kombinationen aus Gas-Geschwindigkeit und -Temperatur vermessen. Zudem wurde seitens EP ein Mischelement zur Verfügung gestellt, sodass ein Großteil der Betriebspunkte einmal mit Mischelement und einmal ohne Mischelement gemessen werden konnte. Die Ammoniakverteilung wurde dabei aufgrund der Toxizität von Ammoniak indirekt gemessen. Dazu stellte EP ebenfalls einen Oxidations-Katalysator bereit, welcher Ammoniak zu Stickoxiden umwandelt und im hinteren Bereich der Mischstrecke eingebaut wurde. Die Lanze des FTIR-Systems, mit welcher die zu analysierende Gas-Probe abgesaugt wird, wurde wenige Millimeter hinter dem Katalysator platziert, sodass davon ausgegangen werden kann, dass die gemessene Stickoxidverteilung hinter dem Katalysator der Ammoniakverteilung vor dem Katalysator entspricht. Im Rahmen einer Vorabstudie zeigte eine Variation des Abstands der Lanze zum Katalysator in einem Bereich von 30 mm zudem einen geringen Effekt auf die gemessene Verteilung sowie auf die Wiederholgenauigkeit. Im Rahmen der Messungen wurde die

Lanze des FTIR-Spektrometers über eine Traverse innerhalb der Mischstrecke entlang des Rohrquerschnitts verfahren. In der Regel wurde dabei alle 30 mm in horizontaler und vertikaler Richtungen Messungen durchgeführt, sodass das resultierende Verteilungs-Feld aus insgesamt 89 Stützstellen besteht. Dabei wurde in jeder Position nach einer Einschwingzeit von 10 Sekunden für eine Messdauer von weiteren 20 Sekunden verharrt und Messwerte mit einer Frequenz von 5 Herz aufgezeichnet.

Grundsätzlich konnte festgestellt werden, dass eine hohe Zerstäubungsluftmenge die Gleichverteilung erheblich begünstigt. Weiterhin kann ein erhöhter Einfluss der Gasgeschwindigkeit auf die Gleichverteilung beobachtet werden. Der Einsatz des Mischers erweist sich ebenfalls als sinnvoll, wobei der Effekt des Mischers in einigen Betriebspunkten weniger stark ausgeprägt ist. Im Folgenden wird eine Auswahl an Ergebnissen genauer beleuchtet.

Die Abbildung 39 zeigt die NO_x-Verteilung über dem Rohrquerschnitt für die Zerstäubungsluftströme 20 l/min, 15 l/min und 10 l/min. Dabei steht eine gelbliche Einfärbung für eine hohe Konzentration und eine blaue Einfärbung für eine geringe Konzentration. Zudem ist jeweils die über den Querschnitt gemittelte Konzentration (oben links) und der Gleichförmigkeitsindex (unten links) notiert. Es zeigt sich, dass bei geringeren Zerstäubungsluftströmen sich ein Bereich mit einer stark erhöhten NO_x-Konzentration in der oberen Rohrhälfte ausbildet. Bei Erhöhung des Zerstäubungsluftvolumenstroms wird das Maximum der NO_x-Konzentration einerseits weiter in das Zentrum des Rohrs transportiert und andererseits in seiner Ausprägung deutlich geschwächt, was für eine gleichmäßigere Verteilung sorgt. Dies spiegelt sich auch im Gleichförmigkeitsindex wider. Dieser steigert sich von 0,75 bei 10 l/min auf 0,875 bei 20 l/min.

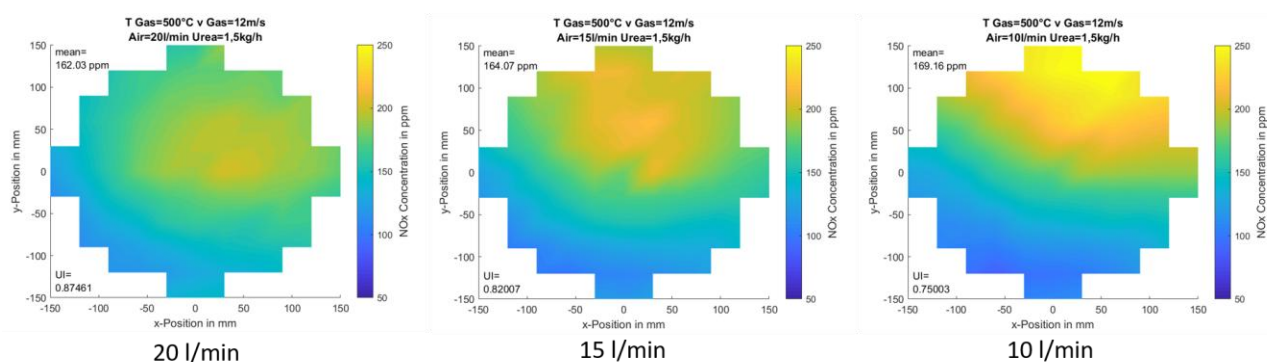


Abbildung 39: Gemessene NO_x-Konzentrationen unter Variation der Zerstäubungsluft

Abbildung 40 zeigt die NO_x-Verteilungen für die Gasgeschwindigkeiten von 12 m/s und 20 m/s jeweils mit und ohne Mischer. Es wird ersichtlich, dass bei den Messpunkten mit erhöhter Gasgeschwindigkeit eine um rund 50 % verringerte NO_x-Konzentration gegenüber den Messpunkten mit geringerer Gasgeschwindigkeit gemessen wird. Dies auf eine Verdünnung der Gasströmung mit zusätzlicher Luft zurückzuführen, welche für die Erhöhung der Gasgeschwindigkeit benötigt wird. Für die Beurteilung der Gleichverteilung ist dies jedoch unerheblich. Generell zeigt sich, dass der Gleichverteilungsindex bei geringerer Gasgeschwindigkeit höher ausfällt. Bei geringerer Geschwindigkeit steht mehr Zeit für die Vermischung zur Verfügung. So kommen hier Diffusionseffekte stärker zum Tragen. Weiterhin ist der Einfluss der Eindüsung gegenüber der Gasströmung erhöht, weshalb die HWL tiefer in die Strömung eindringen kann, bevor es zur Verdampfung und einem Impulsverlust an den Tropfen kommt. Der Einsatz des Mischers lässt sich grundsätzlich als positiv bewerten. Bei geringerer Gasgeschwindigkeit verhilft der Mischer zu einem Gleichverteilungsindex von rund 95 %, was eine Steigerung von rund 1,5 Prozentpunkten entspricht, während bei erhöhter Gasgeschwindigkeit eine Steigerung von 3,5 Prozentpunkten auf 89 % Gleichverteilung erreicht wird. Als weiteres Merkmal bei Einsatz des Mischers verändert sich die NO_x-Verteilung über dem Querschnitt. So zeigt sich ohne Mischer eine erhöhte Konzentration in der oberen Rohrhälfte, während sich mit Mischer eine erhöhte Konzentration, wenn auch weniger stark ausgeprägt, in der rechten Rohrhälfte ausmachen lässt. Diese Verteilung wird direkt durch die Ausrichtung des Mischers vorgegeben. So konnte in zusätzlichen Messungen festgestellt werden, dass bei einem Mischer, der zu den hier vorliegenden Messungen um 90° gedreht ist, auch das Verteilungs-Bild entsprechend 90° gedreht wird.

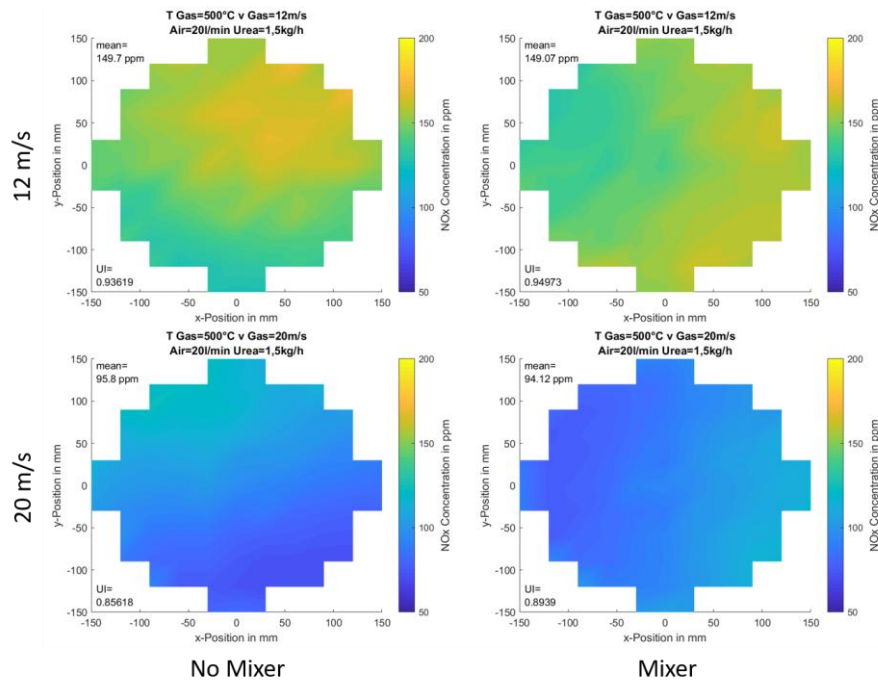


Abbildung 40: Gemessene NO_x-Konzentrationen unter Variation der Gasgeschwindigkeit jeweils mit und ohne Mischelement

Abbildung 41 zeigt die NO_x-Verteilungen für die Brenner-Austritts-Temperaturen 500°C, 450°C und 400°C. Bei konstanter Menge eingedüster HWL erhöht sich die gemessene NO_x-Konzentration zwischen 400°C und 450°C um rund ein Drittel und zwischen 400°C und 500°C um rund die Hälfte. Dafür verantwortlich ist einerseits die Geschwindigkeit der Hydrolyse-Reaktion, die bei geringeren Temperaturen deutlich langsamer abläuft und andererseits eine direkte Beeinflussung der Katalysatoraktivität durch die Abgastemperatur. Die Abgastemperaturen haben hingegen keinen signifikanten Einfluss auf die Gleichförmigkeit. Der Gleichförmigkeitsindex variiert hier für alle Punkte unter Einsatz des Mischers um weniger als einen Prozentpunkt. Auch die Mischer-typische Verteilung mit einer erhöhten Konzentration zur rechten Rohrhälfte lässt sich bei allen dargestellten Punkten ausmachen.

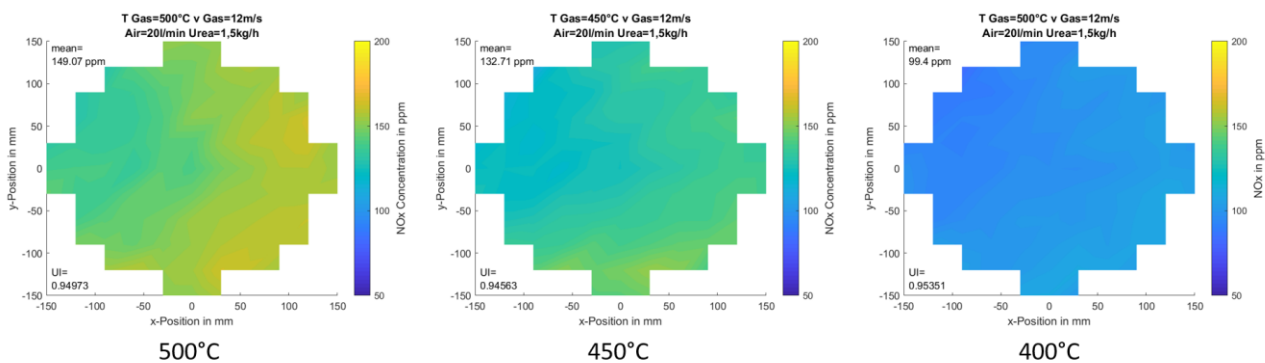


Abbildung 41: Gemessene NO_x-Konzentrationen unter Variation der Gastemperatur

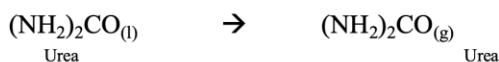
AP 5.2 Validierung Fluidodynamik, Energie und Stofftransport

Ziel dieses Arbeitspakets ist es, die Leistung der verfügbaren numerischen Modelle bei der Vorhersage der Ammoniakverteilung im Abgas zu validieren und sie gegebenenfalls für einen optimalen Simulationsprozess weiter zu kalibrieren. Dieses Arbeitspaket besteht aus zwei Aspekten. Der erste Aspekt ist auf die Schaffung eines stabilen Simulationsaufbaus fokussiert, der die Injektion der Harnstoff-Wasser-Lösung, den Wärmeübergang zwischen dem Spray und dem Abgas, den Stoffübergang zwischen den Phasen und die Stoffarten integriert. Der zweite Teil dieses Arbeitspakets konzentriert sich auf die Genauigkeit der chemischen Reaktionsrate und verwendet die experimentellen Ergebnisse aus WP5.1 zur Validierung.

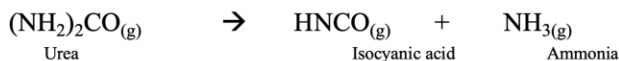
In diesem Arbeitspaket werden die chemischen Reaktionen Thermolyse und Hydrolyse (Abbildung 42) validiert. In der vorliegenden Arbeit wurde ein Einspritzsystem untersucht, das bei hohen Temperaturen und hohen Abgasgeschwindigkeiten betrieben wird, während die Harnstoffzersetzung in der Literatur

üblicherweise bei niedrigeren Betriebstemperaturen und Abgasgeschwindigkeiten analysiert wurde. Daher wurde die Simulation zunächst für einen bereits untersuchten Anwendungsfall aus der Literatur verwendet. In dieser Voruntersuchung wurde die simulierte Harnstoffzersetzung überprüft und mit den Arbeiten von Birkhold [14] und Yim et al. [16] verglichen. Anschließend wurde die Simulation für das in dieser Arbeit untersuchte Einspritzsystem anhand experimenteller Daten validiert

1. Step: Urea evaporation



2. Step: Thermolysis



3. Step: Hydrolysis

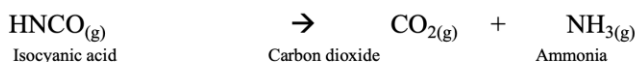


Abbildung 42: Reaktionsgleichungen zu Thermolyse und Hydrolyse

Die durchgeführte Simulation zeigte, dass sich der Harnstoff ((NH₂)₂CO) in unmittelbarer Nähe der Düse konzentriert. Der Massenanteil des verdunsteten Harnstoffes ist bereits an der ersten Messstelle gering (unter 20 ppm). Da die Zersetzung von der Harnstoffkonzentration abhängt, ist ein erhöhter Massenanteil von Ammoniak (NH₃) in der Nähe der Düse zu beobachten. Mit zunehmender Entfernung von der Einspritzstelle breitet sich das Reaktionsprodukt NH₃ aus. Die beschriebene Verteilung vom Harnstoff und Ammoniak ist in Abbildung 43(b) dargestellt.

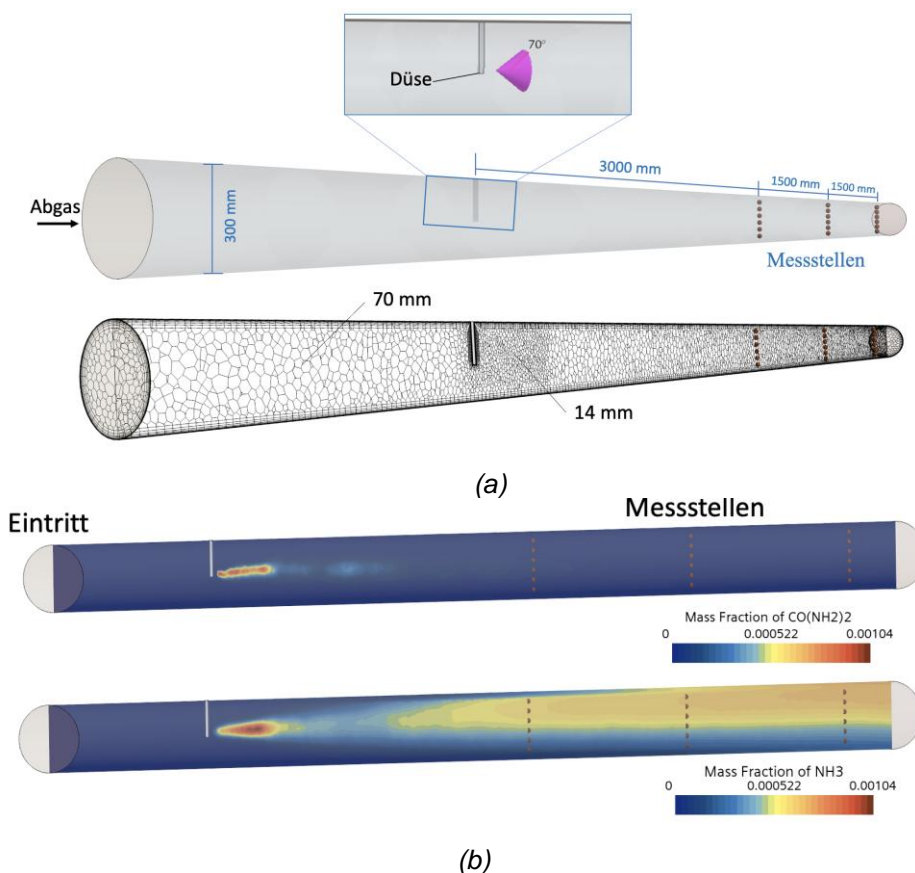


Abbildung 43: Schematische Darstellung des Experiments von Yim et al [16] (oben). Längsschnitt des Gitters (unten). (a) und Harnstoff-Verteilung auf der Längsschnittfläche des Abgasrohres (oben). NH₃-Verteilung auf einer Längsschnittfläche des Abgasrohres (unten) (b). 6 m/s und 400 °C.

Zwischen dem Einspritzpunkt und der ersten Messstelle ist ein Bereich mit geringeren NH_3 -Konzentrationen. Enthalten sind hauptsächlich Isocyan säure und Wasser. Aufgrund der eingespritzten Harnstoffwasserlösung (HWL) sind die Temperaturen in der Nähe der Düse relativ niedrig (siehe die Tropfentemperatur in Abbildung 44). Die temperaturabhängige Zersetzung erfolgt daher in diesem Bereich langsamer. Obwohl eine Verdunstung stattfindet, reagiert der verdunstete Harnstoff in der Gasphase nicht sofort. Dieser wird vom Abgas kontinuierlich aufgeheizt, wodurch die Temperaturen sowie die damit verbundene Reaktionsgeschwindigkeit steigen.

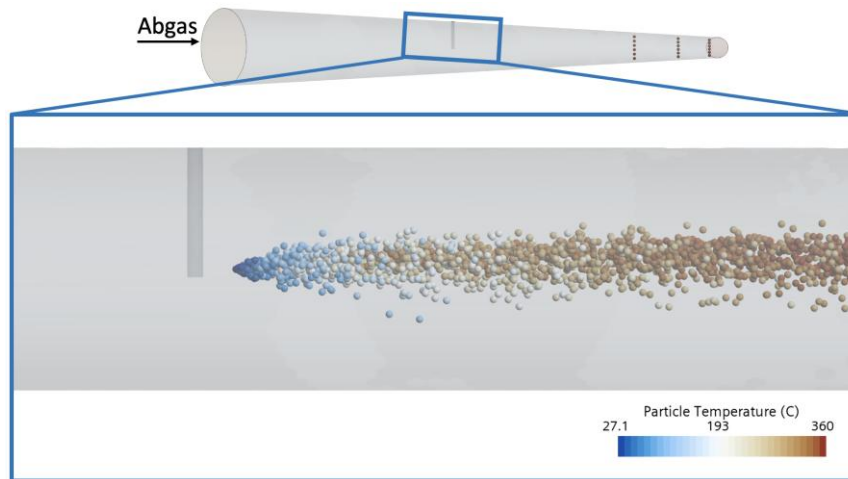


Abbildung 44: Tropfentemperatur. 6 m/s und 400 °C.

Die oben durchgeführte grafische Auswertung bestätigt die von Birkhold [14] beschriebene Temperatur- und NH_3 -Verteilung. Der Massenanteil von NH_3 wird ebenfalls durch die Hydrolyse von Isocyan säure (HNCO) erhöht. Um diese Reaktion entlang des Abgasrohres zu beobachten, sind die Edukte Wasser und HNCO sowie das Produkt Kohlendioxid (CO_2) in Abbildung 45 dargestellt.

Der CO_2 -Massenanteil weist auf den Bereich hin, in dem die Hydrolyse stattfand. Laut Birkhold [14] liegt Wasserdampf im Überfluss vor. Dies wird durch den Massenanteil von Wasser in Abbildung 45 bestätigt. Mit zunehmendem Abstand von der Düse reagiert die HNCO aufgrund der Temperaturverteilung schneller, wodurch der HNCO -Massenanteil stromabwärts abnimmt. Zwischen dem Spray und der ersten Messstelle befinden sich überwiegend HNCO und Wasser, während sich am Ende des Abgasrohres NH_3 konzentriert. Ein Teil der HNCO erreicht erwartungsgemäß das Ende des Abgasrohres, ohne zu reagieren. Folglich würde HNCO in den SCR-Katalysator gelangen. Dennoch wird die Bereitstellung des Reduktionsmittels

NH_3 nicht beeinträchtigt, da laut Yim et al. [16] die Aktivierungsenergie der Hydrolyse im Katalysator erheblich sinkt (von 62 178 J/mol auf 15 815 J/mol). Die HNCO wird daher zu NH_3 reagieren. Im nächsten Abschnitt werden die chemischen Reaktionen mittels des NH_3 -Umsatzes quantitativ analysiert.

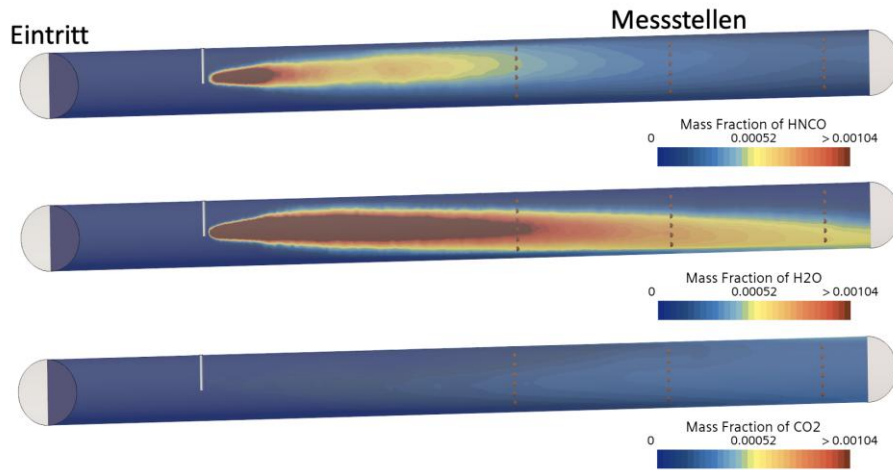


Abbildung 45: : HCNCO-Verteilung auf der Längsschnittfläche des Abgasrohres (oben). Wasserverteilung auf der Längsschnittfläche des Abgasrohres (Mitte). CO₂-Verteilung auf einer Längsschnittfläche des Abgasrohres (unten). 6 m/s und 400 °C

Abbildung 46 (a) stellt den NH₃-Umsatz in Abhängigkeit von der Verweilzeit für die Betriebstemperaturen 300, 350 und 400 °C sowie bei einer Abgasgeschwindigkeit von 6 m/s dar. Mit abnehmenden Betriebstemperaturen steigt die Abweichung zwischen den experimentellen Daten von Yim et al [16]. und den Simulationsdaten. Während die absolute Abweichung bei 400 °C maximal 4% beträgt, liegt der NH₃-Umsatz bei 300 °C und einer Verweilzeit von etwa 450 Sekunden um 37,81% höher als der von Yim et al. [16] ermittelte NH₃-Umsatz.

Die große Abweichung bei niedrigen Betriebstemperaturen lässt sich durch eine überschätzte Hydrolyse erklären. Bei 300 °C oder niedrigeren Temperaturen verläuft die Hydrolyse von HCNCO mit geringerer Reaktionsrate. In weiteren Forschungsarbeiten könnte der Einfluss der kinetischen Parameter bei niedrigen Temperaturen untersucht werden. Die Betriebstemperaturen der vorliegenden Arbeit übersteigen 400 °C. Für diese Untersuchung sind höhere Abgasgeschwindigkeiten sowie höhere Betriebstemperaturen relevant (siehe Betriebsparameter in Tabelle 4.1). Daher werden die Simulationsergebnisse bei 400 °C und einer Abgasgeschwindigkeit von 10 m/s mit den Daten von Birkhold [14] verglichen, um die Genauigkeit der simulierten chemischen Reaktionen zu analysieren (siehe Abbildung 46 (b)).

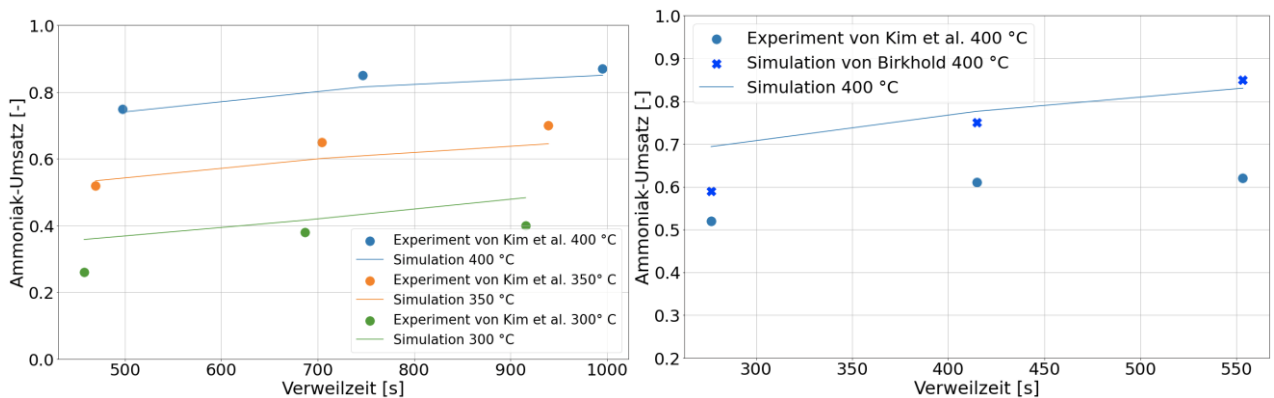
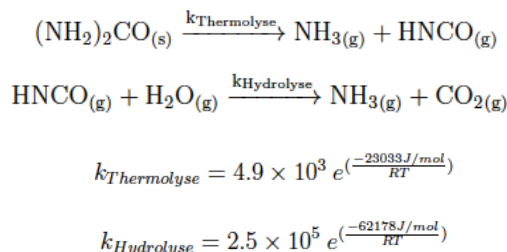


Abbildung 46: Experimenteller und simulierter NH₃-Umsatz in Abhängigkeit von der Verweilzeit. 6 m/s (a) and Experimenteller und simulierter NH₃-Umsatz in Abhängigkeit von der Verweilzeit. Betriebsparameter: 10 m/s und 400 °C (b).

Mit zunehmender Abgasgeschwindigkeit sinkt die Verweilzeit und somit der NH₃-Umsatz. In der Simulation sowie in der Arbeit von Birkhold [14] liegt jedoch der NH₃-Umsatz deutlich höher als im Experiment. Die von Birkhold [14] angepassten kinetischen Parameter beschreiben daher die Harnstoffzersetzung bei niedrigen Abgasgeschwindigkeiten präziser. Ab 10 m/s steigt die Abweichung zwischen Experiment und Simulation. Die chemische Reaktion verläuft in der Simulation schneller als erwartet. Die Ergebnisse stützen die Erkenntnisse aus der bereits von Birkhold [14] durchgeführten Studie. Die angepassten kinetischen Parameter sind bei hohen Abgasgeschwindigkeiten mit Unsicherheiten behaftet. Für die folgenden Untersuchungen werden die Parameter von Yim et al. [16] ohne Anpassungen verwendet. Die Parameter sind in den folgenden Gleichungen aufgeführt:



Validierung mit den Ergebnissen der Experimente aus WP 5.1

Nachdem die Parameter für die chemischen Reaktionen wie oben beschrieben bestimmt wurden, werden nun die Ergebnisse der Experimente in WP 5.1 verwendet, um den entwickelten numerischen Ansatz weiter zu validieren.

Numerischer Ansatz

Die Analyse des Strömungsverhaltens wurde mithilfe der Simulationssoftware Simcenter Star CCM+ (Version 2306 18.04.008) im Betriebssystem Linux durchgeführt. Star CCM+ nutzt die Finite-Volumen-Methode. Um die vorhandene Zweiphasenströmung zu simulieren, wurde das Euler-Lagrange-Verfahren verwendet. Das Abgas wurde als kontinuierliches Fluid betrachtet (Euler'sche Perspektive), während die HWL-Tropfen als Partikel modelliert wurden (Lagrange'sche Perspektive). Hierfür stellt Star CCM+ die Funktionen „Lagrangian-Multiflow“ und „solid cone injector“ zur Verfügung. Die von Savci et al. [17] empfohlene Parcels-Anzahl wurde verwendet (500 Parcels). Aufgrund des hohen Rechenaufwands wurde in dieser Arbeit weder die Strömung innerhalb der Zweistoffdüse noch die Luftunterstützung simuliert. Die HWL wurde bereits als disperse Phase betrachtet. Folglich wurde die Primärzerstäubung (Primary Atomization) in der Simulation nicht berücksichtigt, weshalb weder LISA-Modell noch Huh-Modell angewendet wurden. Die Simulation wurde instationär durchgeführt. In Tabelle 3 sind die eingesetzten Modelle und Korrelationen für die kontinuierliche und disperse Phase aufgeführt.

Tabelle 3: Eingesetzte Modelle in STAR-CCM+

Kontinuierliche Phase	Disperse Phase
Reynolds-Averaged Navier-Stokes	KHRT Breakup
k-ε Turbulence	NTC Collision Model
Ideal gas	Drag: Schiller-Naumann
Reacting flow (Arrhenius)	O'Rourke method
Implicit Unsteady	Constant Density
-	Shear Lift Force: Sommerfeld
-	Two-Way Coupling
-	Turbulent Dispersion
-	Sherwood Number: Ranz-Marshall

Um die Genauigkeit der simulierten Randbedingungen zu gewährleisten, wurden die Wärmedurchgangskoeffizienten der Rohrwände für jeden Fall auf der Grundlage der Temperaturdaten aus den Experimenten in WP5.1 berechnet, wie in Tabelle 4 dargestellt.

Tabelle 4: Berechneter Wärmedurchgangskoeffizient in Abhängigkeit vom Betriebspunkt

BP	Abgasgeschwindigkeit	Statischer Mischer	Temperatur [°C]		Wärmedurchgangskoeffizient $\left[\frac{W}{m^2K}\right]$
	[m/s]		Eintritt	Austritt	
I	12	Ohne	400	348,8	22,56
II	12	Ohne	500	443,0	18,12
III	20	Ohne	400	369,9	17,98
IV	20	Ohne	450	422,4	15,16
V	20	Ohne	500	466,9	15,69
VI	12	Mit	500	452,5	14,57

Die Ergebnisse der numerischen Simulationen auf der Grundlage des oben in Tabelle 3 dargestellten Ansatzes für ausgewählte relevante Fälle sind in Tabelle 5 und Abbildung 47 sowie Abbildung 48 dargestellt.

Diese Untersuchung zeigt, dass die simulierten Temperaturen in ausreichender Übereinstimmung mit den experimentellen Daten stehen. Da die Abweichung der mittleren Austrittstemperatur gering ist (weniger als 1,7 % für alle Betriebspunkte), kann die Simulation in Bezug auf die Temperaturverteilung als validiert angesehen werden.

Tabelle 5: Experimentelle und simulierte mittlere Temperaturen am Ende des Abgasrohres in Abhängigkeit vom Betriebspunkt. BP- Betriebspunkt.

BP	Abgasgeschwindigkeit [m/s]	Temperatur Eintritt [°C]	Statischer Mischer	Austrittstemperatur [°C]		Abweichung [%]
				Experiment	Simulation	
I	12	400	Ohne	348,8	349,5	0,2
II	12	500	Ohne	443,2	442,5	0,1
III	20	400	Ohne	369,9	370,9	0,3
IV	20	450	Ohne	422,4	416,9	1,3
V	20	500	Ohne	466,9	459,0	1,7
VI	12	500	Mit	452,5	449,3	0,7

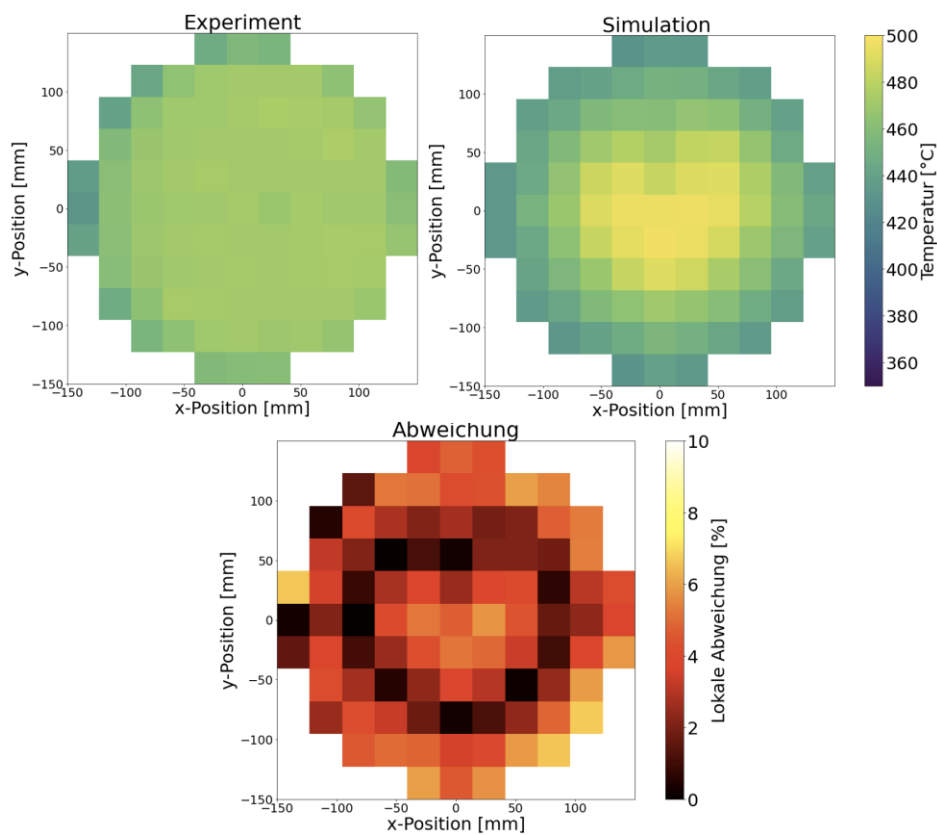


Abbildung 47: Abgleich der experimentellen und simulierten Temperaturverteilung für Betriebspunkt V (oben). Lokale Abweichung der Temperaturverteilung (unten).

Zur Validierung der Harnstoffzerersetzung wurde der mittlere Massenanteil von NH_3 am Austritt des Abgasrohres herangezogen. Dieser ist in Tabelle 6 in Abhängigkeit vom Betriebspunkt aufgeführt. Analog zur Validierung der Temperaturverteilung wurde die NH_3 -Verteilung am Austritt des Abgasrohres für die Betriebspunkte mit den höchsten und niedrigsten Abweichungen überprüft. Abbildung 49 stellt die NH_3 -Verteilung sowie ihre lokale Abweichung für den Betriebspunkt IV dar.

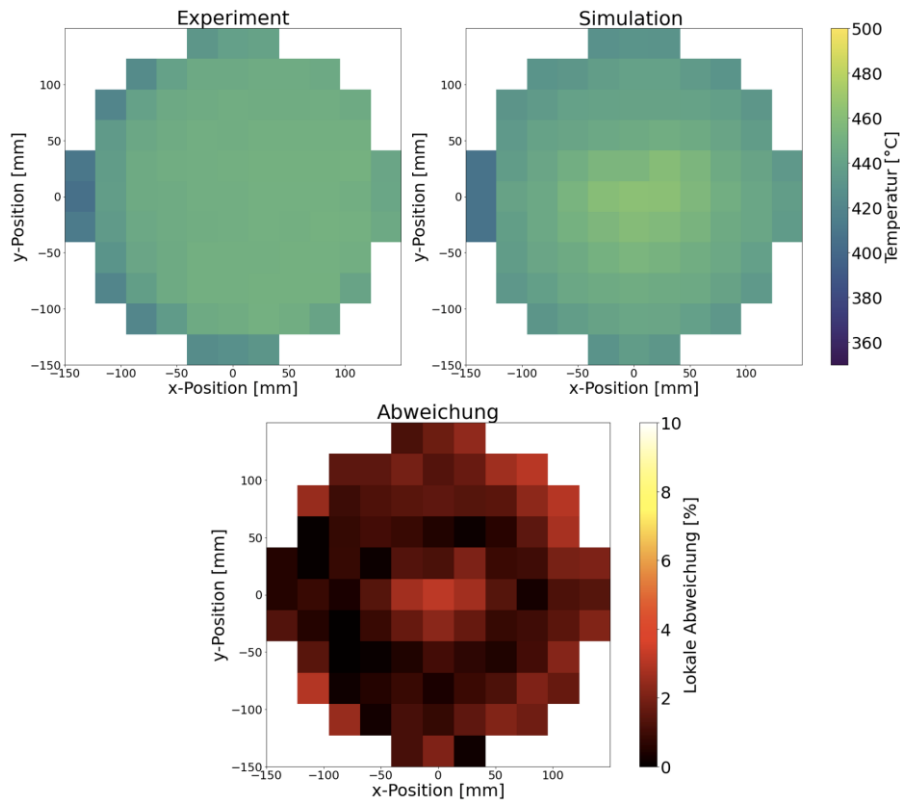


Abbildung 48: Abgleich der experimentellen und simulierten Temperaturverteilung für Betriebspunkt II (oben). Lokale Abweichung der Temperaturverteilung (unten).

Tabelle 6: Experimentelle und simulierte mittlere NH_3 -Massenanteile am Ende des Abgasrohres in Abhängigkeit vom Betriebspunkt BP.

BP	Abgasgeschwindigkeit [m/s]	Temperatur Eintritt [°C]	Statischer Mischer	NH_3 -Massenanteil [ppm]	Abweichung [%]	
				Experiment	Simulation	
I	12	400	Ohne	97,56	100,47	3,0
II	12	500	Ohne	149,7	147,06	1,8
III	20	400	Ohne	60,63	56,81	6,3
IV	20	450	Ohne	79,28	72,27	8,8
V	20	500	Ohne	95,80	101,05	5,5
VI	12	500	Mit	149,13	141,7	5,0

Für den Betriebspunkt IV liegt die mittlere lokale Abweichung bei 11,2 %. Im oberen Bereich des Abgasrohres weist die lokale Abweichung maximal 26,1% auf. Der Gleichverteilungsindex erreicht 86,0% im Experiment und 79,0% in der Simulation. Die Abbildung 50 zeigt den Abgleich der experimentellen und simulierten NH_3 -Verteilungen für den Betriebspunkt II.

Während die mittlere lokale Abweichung bei 4,6% liegt, ist für den Betriebspunkt II die maximale lokale Abweichung weniger als 16,0 %. Somit hat Betriebspunkt II die niedrigste Abweichung. Der Gleichverteilungsindex erreicht 93,6% im Experiment und 92,2% in der Simulation. Die Abweichung ist von der Abgasgeschwindigkeit unabhängig. Betriebspunkt IV und V haben eine Abgasgeschwindigkeit von 20 m/s. Jedoch ist die lokale Abweichung deutlich niedriger (siehe Abbildung 51). Für Betriebspunkt V liegt die mittlere lokale Abweichung bei 8,2% und die maximale lokale Abweichung bei 19,0%.

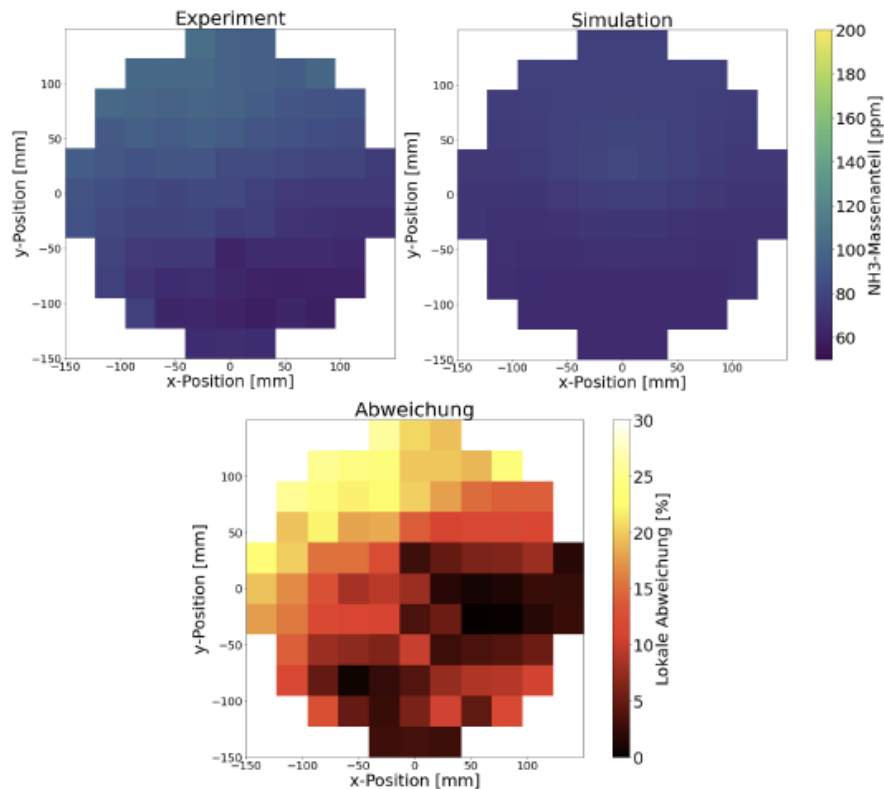


Abbildung 49: Abgleich der experimentellen und simulierten NH₃-Verteilung für Betriebspunkt IV (oben). Lokale Abweichung der NH₃-Verteilung (unten).

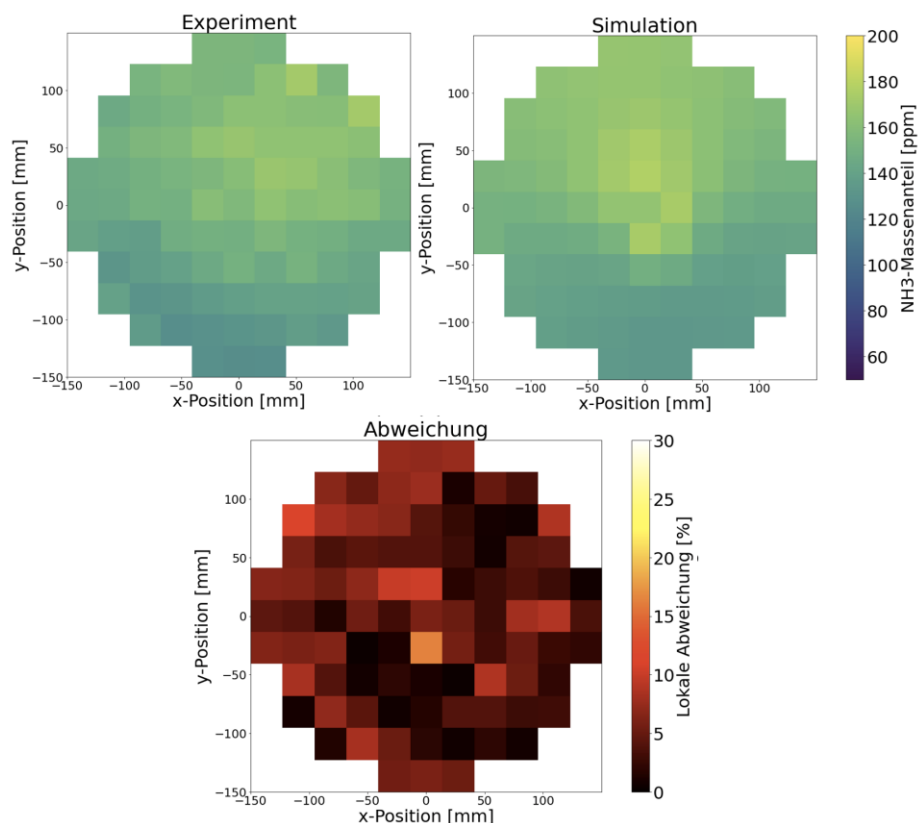


Abbildung 50: Abgleich der experimentellen und simulierten NH₃-Verteilung für Betriebspunkt II (oben). Lokale Abweichung der NH₃-Verteilung (unten).

Sowohl im Experiment als auch in der Simulation wurde eine asymmetrische Verteilung von NH₃ beobachtet. Der obere Bereich weist höhere NH₃-Konzentrationen auf als der untere Bereich. Der Grund dafür wurde bereits von Ström et al. [18] erklärt: „Die kleineren Tröpfchen werden schneller vom Hauptstrom mitgerissen und erscheinen daher auf der Seite des Rohrs, die dem Injektor am nächsten ist. Da die kleinsten Tröpfchen auch diejenigen sind, die zuerst ihr Wasser verlieren und sich zu zersetzen beginnen, wird der größte Teil des

Ammoniaks, das vor dem Eintritt in den Katalysator freigesetzt wird, in diesem Teil des Rohrs vorhanden sein“. Diese Begründung wird im Folgenden überprüft, wobei die simulierte NH₃-Verteilung eine ausreichende Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zeigt. Dennoch müssen die folgenden Fehler berücksichtigt werden: Der Massenanteil von Ammoniak zeigt eine Abweichung von 4,6 bis 11,2 %, während der Gleichverteilungsindex eine Abweichung von 1,5 bis 8,4 % aufweist. Dennoch kann die Simulation auch im Hinblick auf den Harnstoffabbau als validiert angesehen werden. Das erste Forschungsziel wurde somit erreicht.

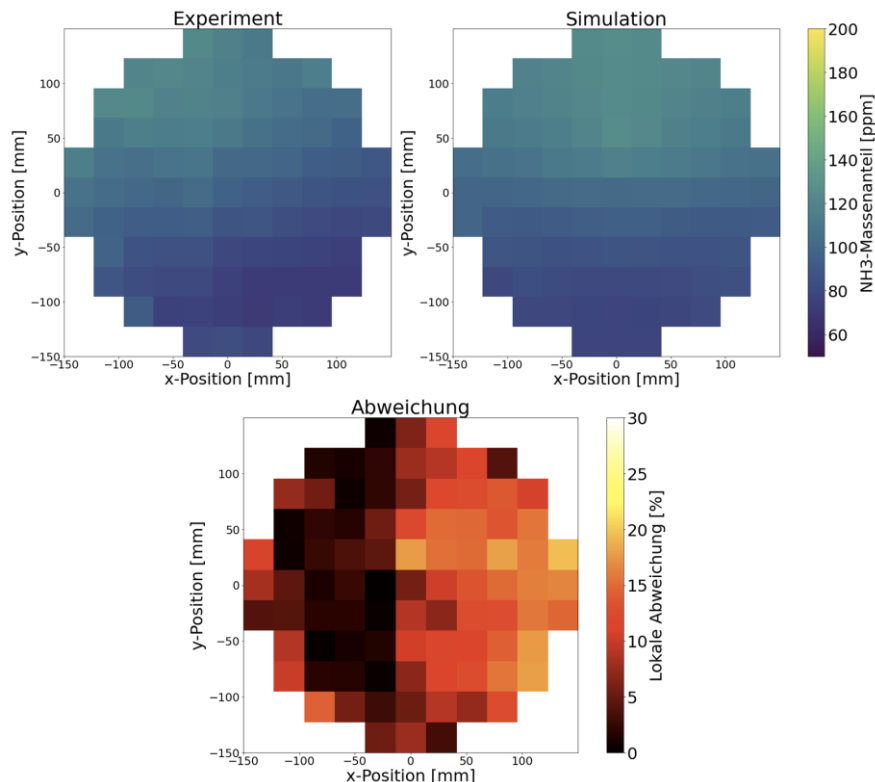


Abbildung 51: Abgleich der experimentellen und simulierten NH₃-Verteilung für Betriebspunkt V (oben). Lokale Abweichung der NH₃-Verteilung (unten).

Arbeitspaket 6: Anwendung „Digitales Abbild“

AP 6.1 Parametervariation zur Prüfung des „Digitalen Abbilds“ (Stresstest)

Am DBFZ (Deutsches Biomasseforschungszentrum gemeinnützige GmbH) wurde ein Reaktor-Prototyp aufgebaut, der sowohl die Reduktionsmittelinjektion als auch die Mischstrecke und den Katalysator in einem Bauteil beherbergt. Der Fokus des 2019 erstellten Konzepts lag darauf mit einer ausreichenden Tropfenverweilzeit die vollständige Verdunstung der HWL-Lösung zu garantieren und die Umsetzung zu Ammoniak vor dem Katalysator abzuschließen. Auf einen statischen Mischer wurde verzichtet. Durch möglichst große Rohrquerschnitte wird der Gesamtdruckverlust geringgehalten. Das Katalysatorvolumen ist entsprechend der Anforderungen an Reduktionsleistung und Gegendruck dimensioniert (SCR: Ø304 mm x 195 mm, Sperrkatalysator: Ø304 mm x 75 mm). In Abbildung 52 ist der prozessintegrierte SCR-Reaktor im Einbauzustand abgebildet. Durch den Einlass gelangt das Abgas in eine Vorkammer. Direkt nach dem Eintritt ist eine Zweistoffdüse eingebracht. Nach der Vorkammer folgt die Mischstrecke, die über ineinander verschachtelte Rohre eine Vor- und Rückbewegung des Abgases erzwingt. Auf einer Aufweitung folgt der Katalysator und abschließend der Auslass.



Abbildung 52. Aufbau des prozessintegrierten SCR Reaktors.

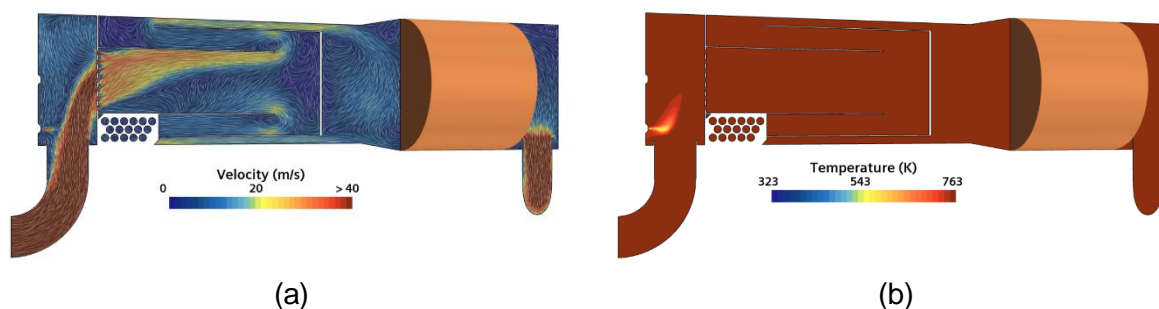
Innerhalb der betrachteten Betriebszeit wurde zu drei Zeitpunkten das Abgas mit Hilfe eines mobilen FTIRs vermessen. Dabei wurde sowohl das Rohgas vor der Reduktionsmittelinjektion als auch das Reingas nach dem Katalysator betrachtet. Tabelle 7 gibt die gemessenen Bedingungen am BHKW an. In der letzten Spalte ist der dazu theoretische AdBlue-Verbrauch für die Standard-SCR Reaktion angegeben. Gemäß des thermodynamischen Gleichgewichts zwischen NO und NO₂, dominiert der Anteil von NO am Eingang. Am Ausgang setzt sich NO_x nur aus NO zusammen.

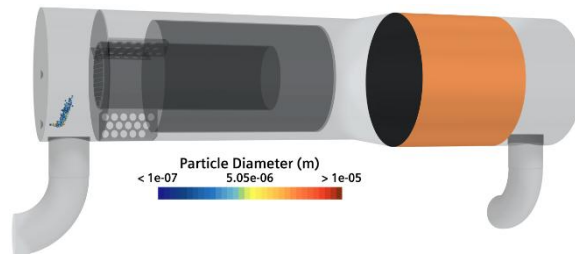
Tabelle 7: Bedingungen der vermessenen Betriebspunkte (Motorleistung 100 % (70 kWel), Volumenstrom 300 Nm³/h, Temperatur 490 °C).

	NO Eingang ppm	NO ₂ Eingang ppm	NO _x Eingang ppm	NO _x Ausgang ppm	AdBlue® L/h
Exp 1 (21.05.19)	338	2	340	53	0,33
Exp 2 (04.11.19)	560	13	573	60	0,58
Exp 3 (28.10.20)	405	25	430	80	0,40

Es wurden die drei gemessenen Betriebspunkte unter Berücksichtigung des theoretischen Reduktionsmittelverbrauchs simuliert. Die Geometrie ist, dem beschriebenen Aufbau aus **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** nachempfunden. Für jede Simulation wurde zunächst das stationäre Geschwindigkeits-, Temperatur- und Konzentrationsfeld gelöst. Anschließend erfolgt die transiente gekoppelte Simulation der Tropfeninjektion.

In Abbildung 53 (a) lässt sich anhand der Geschwindigkeitsverteilung ein Pfad der Hauptströmung ausmachen. Vom Einlass geht er direkt in die Mischstrecke über. Erst im Laufe der Umlenkungen, kommt es zu einer Vergleichmäßigung. Das Gesamtgeschwindigkeitsfeld wird von der Düse und dem Spray nicht beeinflusst. Die Tropfen und die Zerstäubungsluft folgen vielmehr der Strömung, was die Annahme des dominierenden Einflusses durch den Abgasmassenstrom unterstützt. Sie verlieren ihren Impuls sehr schnell und die Tropfengeschwindigkeit ist nach geringem Abstand zur Düse bereits ähnlich der der kontinuierlichen Phase. Das Temperaturfeld aus Abbildung 53 (b) zeigt, dass im Bereich der Injektion mehrheitlich die Verdunstung der HWL stattfindet. Lokal kommt es zu einer Absenkung bis auf 540 K. Die thermische Energie der Gasströmung ist ausreichend, um die Flüssigkeit der Tropfen bereits nach kurzer Zeit und Strecke vollständig in die Gasphase zu überführen. Abbildung 53 (c) veranschaulicht, dass sich bereits nahe des Injektionspunktes der Partikeldurchmesser der Tropfen drastisch verringert. Die vollständige Verdunstung findet trotz der den Strömungsverhältnissen geschuldeten geringen Aufenthaltszeit in der Vorkammer statt.





(c)

Abbildung 53: Eigenschaften der Gesamtströmung und HWL-Injektion: (a) Geschwindigkeitsfeld, (b) Temperaturfeld, (c) Partikelinjektion.

Quantitativ verdeutlicht werden die Beobachtungen durch Abbildung 54 (a) und Abbildung 54 (b). Entlang der Geometrie wurde der Gleichverteilungsindex für die Abgasgeschwindigkeit und den Ammoniakanteil an sechs Stellen ermittelt. Mit der zweiten Umlenkung (UI 4) liegt die Geschwindigkeit mit >95 % nahezu gleichverteilt vor. Der anschließende Übergang führt zu einer deutlichen Ungleichverteilung, die vor dem Katalysator 87 % (UI 6) annimmt.

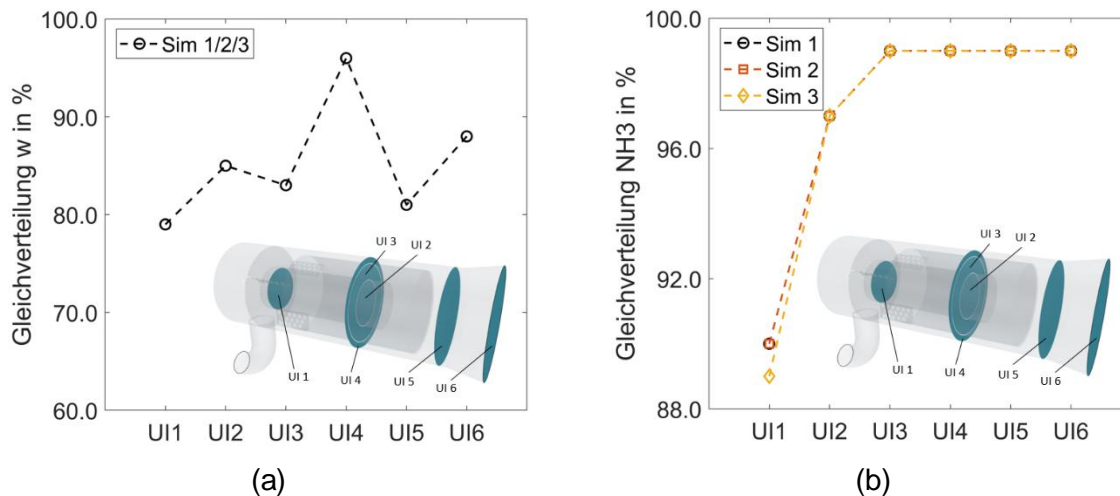


Abbildung 54: Gleichverteilungsindex der Geschwindigkeit (a) und von Ammoniak NH₃ (b) entlang der Geometrie.

Die NH₃-Gleichverteilung entlang der Geometrie ist in Abbildung 54 (b) aufgetragen. Unabhängig von der injizierten AdBlue-Menge ist eine mehrheitlich vollständige Gleichverteilung von 99 % nach der ersten Umlenkung (UI 3) in der Gasströmung erreicht. Es fällt auf, dass sich die NH₃-Gleichverteilung unabhängig zur Geschwindigkeitsgleichverteilung ausbildet. Aufgrund der gleichmäßigen Verteilung von Ammoniak ist eine lokale Überdosierung unwahrscheinlich. In Anbetracht des Sensitivitätsverhaltens der Katalysator-Technologie ist davon auszugehen, dass eine geringe Leistungsvarianz des Katalysators vorliegt, die in der lokalen Geschwindigkeitsverteilung vor dem Katalysator begründet liegt, wobei dadurch verursachter Ammoniakverlust auszuschließen ist. Die Ergebnisse zu den resultierenden NO_x-Emissionen hinter dem Katalysator für die drei untersuchten Betriebs- und Zeitpunkte sind in Tabelle 8 zusammengefasst. Die korrespondierenden Werte aus der Realmessung sind in Klammern angegeben.

Tabelle 8: Zusammenfassung der Ergebnisse aus den Simulationen zu den drei Betriebspunkten.

	UI w in %	UI NH ₃ in %	NO _x Ausgang in ppm	Konversion %	UI NO _x %
Sim 1	87	99	69 (53)	80 (84)	90
Sim 2	87	99	96 (60)	83 (89)	87
Sim 3	87	99	97 (80)	77 (81)	91

Die NO_x-Konversion wird für alle drei Betriebspunkte mit einer Abweichung von 4 bis maximal 6 Prozentpunkten abgebildet. Hinsichtlich des absoluten gemittelten NO_x-Ausgangs ergeben sich Unterschiede mit einer maximalen Differenz von 36 ppm (Sim 2). Da der Fehler eine Abhängigkeit zur Höhe des NO_x-Eingangs anzeigt, liegt er darin begründet, dass die Dosiermenge auf Basis der Standard-SCR Reaktion berechnet und damit ggf. unterschätzt wurde. Mit den durchgeführten Simulationen konnte gezeigt werden,

dass auch bei variierenden Eingangsparametern, wie der Dosiermenge, die Ergebnisse mit experimentellen Daten übereinstimmen.

AP 6.2 Simulation bestehender Anlagen

In diesem Arbeitspaket wurde das kalibrierte digitale Abbild genutzt, um die Ammoniakverteilung in zwei realen BHKW (Blockheizkraftwerk)-Anlagen zu simulieren. Die Simulationen wurden mit dem im Rahmen dieses Projekts entwickelten numerischen Ansatz durchgeführt.

Als Referenz zur Simulation dienen Realanlagen. Im Rahmen einer Messkampagne wurde bei Kunden von Emission Partner mit einer SCR-Abgasnachbehandlung auf mit Biogas betriebenen Motoren die Gleichverteilung am SCR-Katalysator vermessen, damit diese im Anschluss lokal aufgelöst simuliert werden können und die Genauigkeit der Simulationsmodelle hinsichtlich ihrer Abbildfähigkeit geprüft werden kann. Beide BHKW sind mit einem Motor des Typs AVUS 500 plus der Firma 2G ausgestattet.

In der Katalysatorkammer sind seitens Emission Partner nach dem letzten Katalysator standardmäßig 3 Messstutzen eingelassen. Sie dienen für die Integration etwaiger Messinstrumente. In dem vorliegenden Kammerdesign sind die Stutzen, wie in Abbildung 55 dargestellt, radial angeordnet, sodass sich drei Messachsen über den gesamten Katalysatorquerschnitt ergeben.

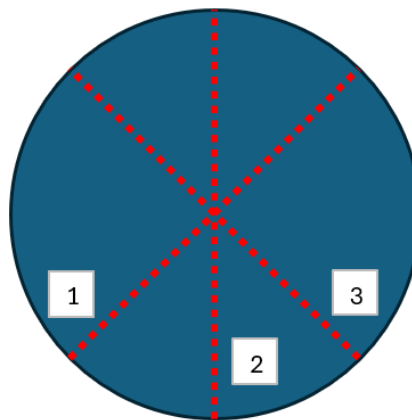


Abbildung 55: Messachsen in der Katalysatorkammer hinter der letzten Katalysatorscheibe je nach Ausrichtung der Messstutzen diagonal und gerade.

Als Messsystem wurde ein NOVaplus der Firma MRU verwendet. Dabei wurde $\text{NO}+\text{NO}_2$ als NO_x in ppm gemessen. Entsprechend der homogenen Verteilung von NO_x im Abgas vor dem Katalysator kann anhand der über den Katalysator reduzierten Werte auf die Verteilung des Ammoniaks als Reduktionsmittel vor dem Katalysator geschlossen werden. Damit sollte der Gleichverteilungsindex von NO_x nach dem Katalysator dem Gleichverteilungsindex von Ammoniak vor dem Katalysator entsprechen. Die Messlanze wurde für die Messaufgabe verlängert, um die gesamte Länge der Achsen vermessen zu können. Entlang jeder Achse wurden fünf Messpunkte angefahren. Der angegebene Messpunkt orientiert sich an der hinteren Wandung, also am Endpunkt der Messachse vom Stutzen aus betrachtet. Jeder Messpunkt stellt den Mittelwert aus einer einminütigen Messung dar. Trotz der Mittelwertbildung kommt es über die gesamte Messfläche zu zeitlichen Schwankungen, die durch den Betrieb des Motors und dem HWL-Dosiersystem induziert werden. Nichtsdestotrotz können die Werte als repräsentativ erachtet werden.

Der numerische Prozess umfasste die Geometrierstellung mittels CAD-Modellierung, das Meshing sowie die Lösung unter Berücksichtigung der relevanten chemischen Reaktionen, die die Ammoniakverteilung bestimmen. Das Hauptziel bestand darin, die Gleichmäßigkeit der NH_3 -Verteilung vor dem Eintritt in den Katalysator zu untersuchen. Die Simulationsergebnisse wurden anschließend mit bestehenden Messdaten von Emission Partner verglichen, um die Vorhersagequalität zu bewerten.

Die Ergebnisse zeigten eine gute Übereinstimmung zwischen der simulierten und der gemessenen Ammoniakverteilung, wodurch die Genauigkeit des numerischen Ansatzes bestätigt wurde. Diese Resultate belegen die Effektivität des entwickelten digitalen Abbilds zur Vorhersage der Ammoniakverteilung in BHKW-Anlagen.

Fallstudie 1: Worther-Modell

Der erste Fall bezieht sich auf das Worther-Modell, ein System, das durch seine kompakte Bauweise gekennzeichnet ist. Aufgrund der begrenzten räumlichen Verhältnisse ist es besonders wichtig, die gleichmäßige Verteilung und Umwandlung von Ammoniak vor dem Eintritt in den Katalysator zu untersuchen.

Die Anlage als Raumaufstellung konzipiert. Nach dem Turbolader erfolgt die Injektion der Harnstoff-Wasser-Lösung. Es folgt ein 90 °-Rohrbogen und in einem geraden Rohrelement statische Mischelemente. In einem Vorkopf wird das Abgas auf die Katalysatorkammer umgelenkt. Die Katalysatoren erfassen einen Durchmesser von 682 mm.

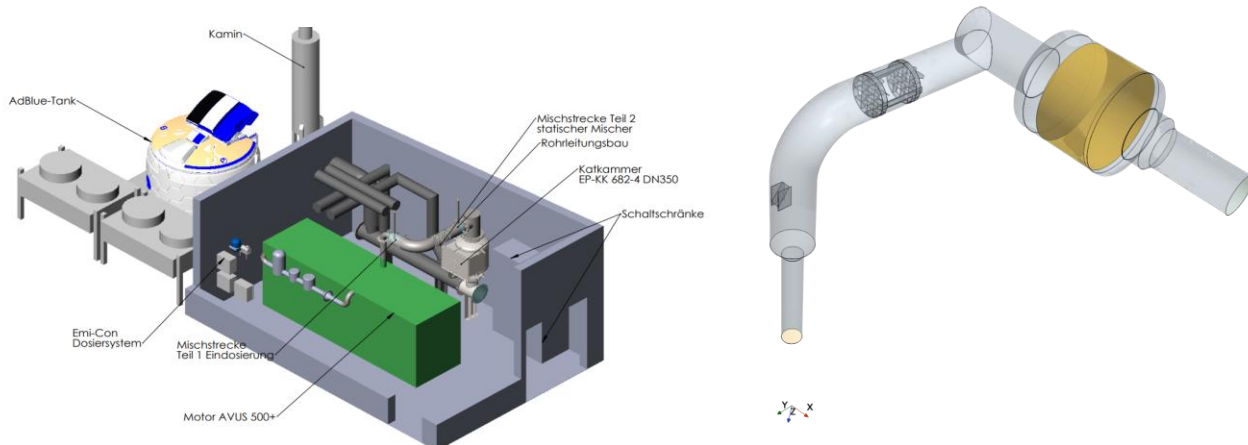


Abbildung 56: Überblick über die Anlage mit der untersuchten Abgasbehandlung (a) und die für die numerische Untersuchung verwendete CAD-Geometrie (b).

Eine Übersicht der Anlage ist in Abbildung 56 (a) dargestellt, während Abbildung 56 (b) die für die Simulation verwendete Geometrie zeigt. Die angewendeten Randbedingungen sind wie folgt:

- Massenstrom: 2.811 kg/h
- Temperatur: 425°C

Parameter des Reduktionsmittels:

- NO_x-Einlasskonzentration: 105 ppm
- NO_x-Auslasskonzentration: 39 ppm
- AdBlue-Verbrauch: 0,64 kg/h (32,5 Gew.-% Harnstoff)

Abbildung 57 zeigt die Massenanteilverteilung von Ammoniak in der Schnittebene direkt vor dem Eintritt in den Katalysator. Die roten Punkte markieren die Messstellen, an denen die experimentellen Daten erfasst wurden.

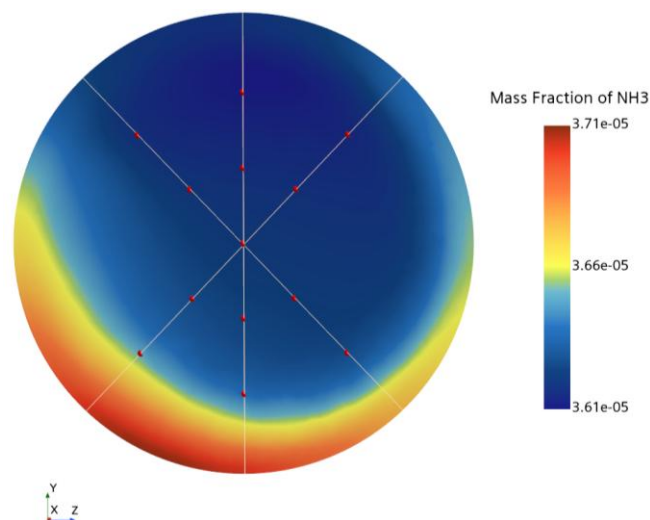


Abbildung 57: Querschnitt durch die räumliche Verteilung von Ammoniak im Strom vor dem Eintritt in den Katalysator. Die drei weißen Linien bezeichnen die in Tabelle 5 aufgeführten Probenahmestellen

Die Simulationsergebnisse zeigen, dass die höchste Ammoniakkonzentration im unteren Bereich des Rohrs liegt. Dennoch beträgt die Abweichung der höchsten Konzentration vom Mittelwert auf dieser Schnittebene nur 1,927%, was auf eine insgesamt gleichmäßige Verteilung hinweist.

Tabelle 9: Zusammenfassung der experimentellen und numerischen Ergebnisse an den durch die roten Punkte Abbildung 57 gekennzeichneten Probenahmestellen.

Messstelle	Links		Mitte		Rechts	
	Messachse 1 (ppm)	Simulation (ppm)	Messachse 2 (ppm)	Simulation (ppm)	Messachse 3 (ppm)	Simulation (ppm)
1	33	36,17	28	36,14	32	36,19
2	38	36,20	33	36,21	31	36,23
3	39	36,24	40	36,24	27	36,24
4	32	36,30	33	36,28	33	35,25
5	40	36,49	25	36,47	28	36,30
Mittlerer Wert (ppm)	36,4	36,28	31,8	36,26	30,2	36,04
Abweichung %	-0,33		14,05		19,34	

Tabelle 9 vergleicht die experimentellen und simulierten Ergebnisse. Es ist wichtig zu beachten, dass die experimentellen Daten die NO_x-Konzentration nach dem Katalysator widerspiegeln, während die numerischen Simulationen die Ammoniakverteilung vor dem Eintritt in den Katalysator darstellen. Die Konzentrationen wurden an den in **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** markierten Stellen erfasst.

Die numerischen Vorhersagen zeigen ein konsistentes Muster einer gleichmäßigen Ammoniakverteilung, da die Werte leicht um 36 ppm schwanken. Im Gegensatz dazu liegt die Bandbreite der experimentellen Messwerte zwischen 25 und 40 ppm, was eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment bestätigt. Numerisch wurde für die untersuchte Ammoniakverteilung im Querschnitt ein Oberflächengleichförmigkeitsindex von 0,997 ermittelt.

Fallstudie 2: Gollern-Modell

Anlage 2 (siehe Abbildung 58) weist einen für den Motortyp klassischen Containeraufbau auf. Wie auch bei Anlage 1 handelt es sich um eine Nachrüstung des SCR-Systems. Nach dem Turbolader im Container folgt die Rohrleitung einem Deckendurchbruch auf das Dach des Containers. In einem senkrecht geführten Rohr befindet sich die Dosierstelle und statische Mischelemente. Daran anschließend folgt ein 180°-Bogen, der in der runden Katalysatorkammer mündet. Die Katalysatoren der Kammer erfassen einen Durchmesser von 682 mm.

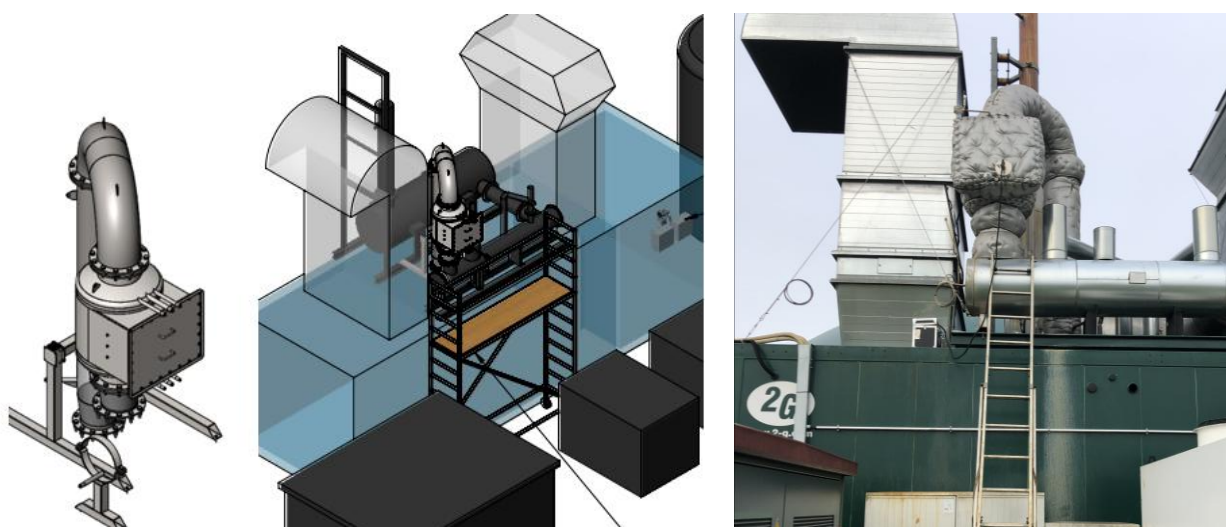


Abbildung 58: Aufbau Anlage 2 mit 2G AVUS 500 plus Kunde Emission Partner (links), Messung mit MRU-Messkoffer zur Bestimmung der Gleichverteilung (rechts)

In dem spezifischen Katalysatorkammerdesign sind die Messstutzen gerade nach vorne ausgeführt. Aufgrund von örtlichen gegebenheiten konnte nur die mittlere Messachse vermessen werden. Die Daten wurden mit den gleichen Methoden und Mitteln wie bei Anlage 1 erhoben. Die Messwerte entsprechen dem Spektrum der ersten Anlage.

1. Geometrie und Modellierung

Für die numerische Simulation wurde die in Abbildung 59 dargestellte CAD-Geometrie verwendet. Diese bildet die reale Struktur der Anlage ab und diente als Grundlage für die Strömungssimulationen.

Der gelbe Zylinder in der Abbildung repräsentiert den porösen Katalysator, bestehend aus vier Scheiben mit einem Durchmesser von 832 mm und einer Tiefe von 90 mm. Um die numerischen Rechenkosten zu senken, wurde der Katalysator nicht direkt als Geometrie modelliert, sondern als poröses Medium mit folgenden Widerstandswerten dargestellt:

- **Viskoser Widerstand:** 454,01 kg/m³·s
- **Trägheitswiderstand:** 4,0863 kg/m⁴

2. Randbedingungen

Die am Eintritt festgelegten Randbedingungen des Abgasstroms lauten:

- **Massenstrom:** 4648 kg/h
- **Temperatur:** 360 °C

3. Validierung mit experimentellen Daten

Zur Validierung der Simulation wurden experimentelle Daten herangezogen. Die relevanten Messdaten wurden direkt vor dem Katalysator aufgenommen. Die folgenden Mittelwerte wurden dabei verglichen:

Tabelle 10: Ergebnisse Gollern Modell

Messgröße	Experiment	Simulation	Abweichung
NOx-Konzentration	85,5 ppm	81,67 ppm	4,48 %
Temperatur	362,26 °C	357,70 °C	1,26 %

Zusätzlich wurde die Oberflächenhomogenität der simulierten Felder bewertet:

- **NOx-Verteilung:** 0,9716
- **Temperaturverteilung:** 0,9998

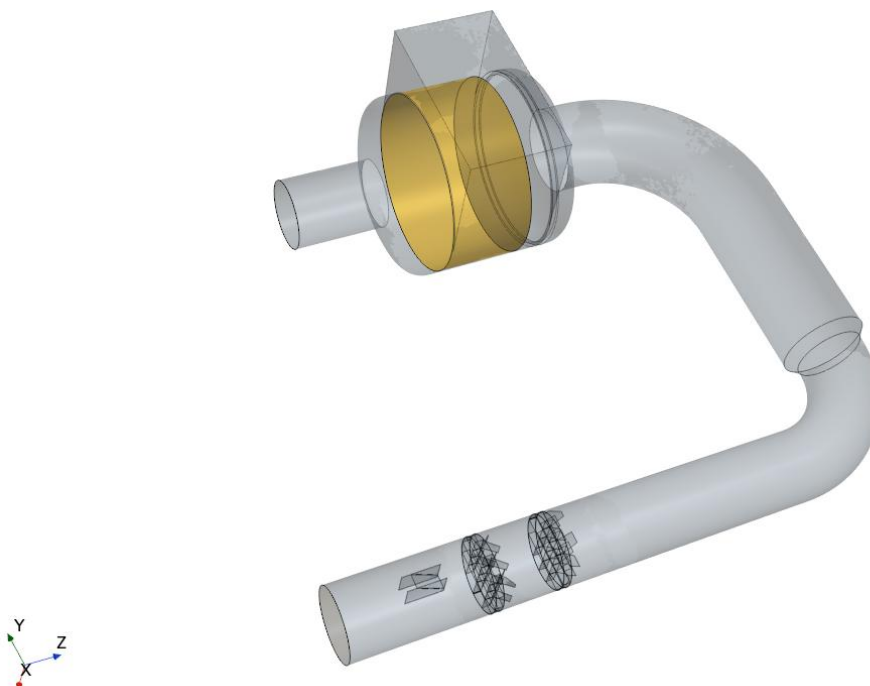


Abbildung 59: Visualisierung der Gollern-CAD-Geometrie, die als numerische Domäne für die Simulationen verwendet wurde. Die gelbe Fläche zeigt den Katalysator.

4. Analyse der Ammoniakverteilung

Wie in Abbildung 60 dargestellt, wurde auch die Ammoniakverteilung vor Eintritt in den Katalysator analysiert. Dabei wurde eine maximale Abweichung von 4,48 % in der vorhergesagten NO_x-Konzentration festgestellt. Diese Abweichung ist vermutlich auf Unsicherheiten in der Messposition zurückzuführen.

Trotz dieser Differenz zeigte sich eine hohe Oberflächenhomogenität (0.97) in der simulierten NH₃-Verteilung.

Die Simulation des Gollern-Modells zeigt eine insgesamt gute Übereinstimmung mit den Messdaten, insbesondere bei der Temperaturverteilung. Die Abweichungen bei der NO_x-Konzentration sind angesichts der Komplexität des Systems und der Messunsicherheiten als akzeptabel zu bewerten.

Diese Fallstudie bestätigt die Praxistauglichkeit des entwickelten numerischen Ansatzes zur Simulation realer industrieller Anwendungen.

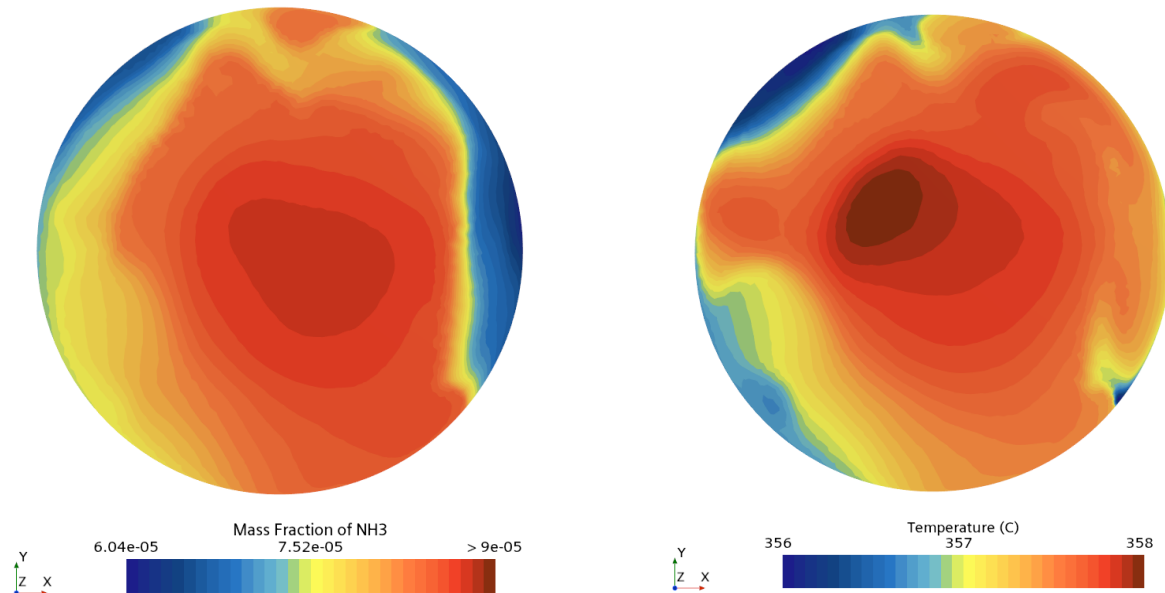


Abbildung 60: Querschnitt durch die räumliche Verteilung von Ammoniak im Strom vor dem Eintritt in den Katalysator (links) und Temperaturverteilung (rechts).

2. Verwertung

a) Erfindungen/Schutzrechtsanmeldungen

Aus dem Projekt sind keine Erfindungen oder Schutzrechtsanmeldungen entstanden.

b) Wirtschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende

Bereits während des Projektes wurden informelle Errungenschaften in Produkte und Designs von Emission Partner integriert. Der wirtschaftliche Erfolg leitet sich daraus ab, dass vorhersagbare vollfunktionsfähige, kompakte und kostengünstige SCR-Systeme angeboten werden können. Daraus ergibt sich ein wirtschaftlicher Vorteil aus dem erarbeiteten technischen Vorsprung. Schon zum Jahr 2023 wurden, mit Absenkung der NO_x-Emissionsgrenze für Biogas-Neuanlagen, über 200 Motoren mit einer vollständig nachgerüsteten SCR-Abgasnachbehandlung ausgestattet. Der Erfolg lag mitunter darin begründet, dass innovative, raumangepasste und montagefreundliche Konzepte angeboten werden konnten.

Insbesondere sollen die wissenschaftlichen und technischen Erkenntnisse in die zu 2029 umzurüstenden kleinen und mittleren BHKW zum Tragen kommen. Hier werden nicht nur kompakte sondern auch sehr kostengünstige Systeme benötigt, um die örtlichen Rahmenbedingungen zu erfüllen und die Verhältnismäßigkeit zu der Motorgröße herzustellen. Sowohl die Verdunstungslänge als auch die anschließende Verteilung des Reduktionsmittels können ausreichend präzise durch Simulationen vorhergesagt werden. Mit diesen technischen Voraussetzungen können wirtschaftliche Vorteile erarbeitet werden. Ein Beispiel hier für ist die funktionsintegrierte kompakte SCR-Applikation „Double-Stack“, welche von Emission Partner für BHKW bis 360 kW elektrische Leistung entwickelt wurde. Die technische Errungenschaft wurde beim Biogas-Innovationskongress 2024 eingereicht und belegte den ersten Platz. Das System spiegelt anhand des Vergleichs von Abbildung 61 und Abbildung 62 die Vorteile eines kompakten Aufbaus wieder und verdeutlicht das wirtschaftliche Potenzial.

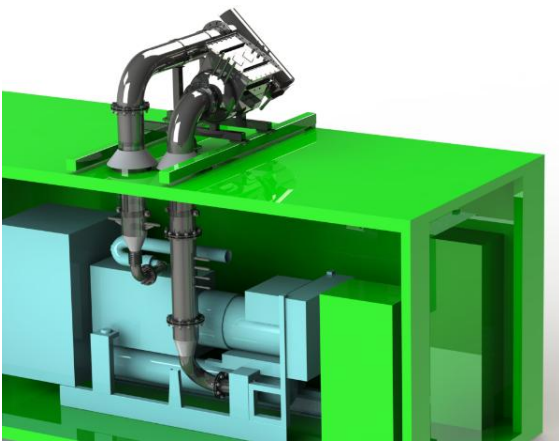


Abbildung 61: Konventioneller Aufbau einer SCR-Abgasnachbehandlung am Beispiel eines Agenitor 406

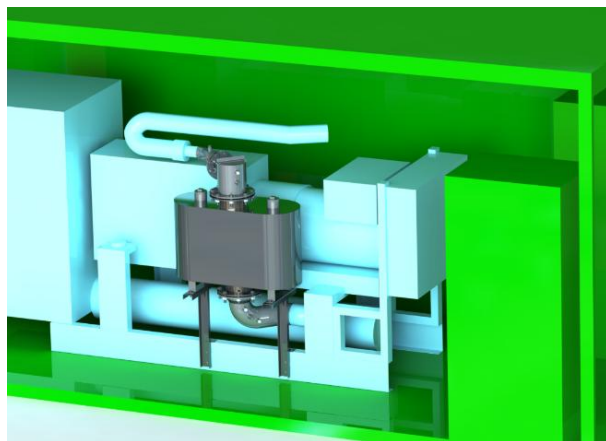


Abbildung 62: SCR-Abgasnachbehandlung mittels Double-Stack am Beispiel eines Agenitor 406

c) Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten nach Projektende

Der technische Erfolg des Förderprojektes ist insofern gegeben, als dass bestehende und zukünftige Produkte und Designs von Emission Partner mit Hilfe von orts aufgelösten Simulationen vorhersagbare Leistungen erzielen. Beispielsweise wurden die statischen Mischelemente in den Standard-Mischstrecken mit Hilfe der Simulationen auf ein Druckverlustminimum optimiert. Ganze Abgasanlagen werden vorab darauf geprüft inwiefern eine angepasste Platzierung der HWL-Injektion einen statischen Mischer ersetzen können. Durch die Sicherstellung der Gleichverteilung des Reduktionsmittels kann das applizierte Katalysatorvolumen bestmöglich ausgenutzt werden. Das bereits unter 2 b) erwähnte Produkt Double-Stack (EP-DS) ist ein klarer Indikator für den technischen Erfolg des Förderprojektes. Ein Testsystem wurde bereits als Pilotanlage aufgebaut und ist mit Messdaten in Abbildung 63 dargestellt. Weitere Kompaktaufbauten werden folgen.

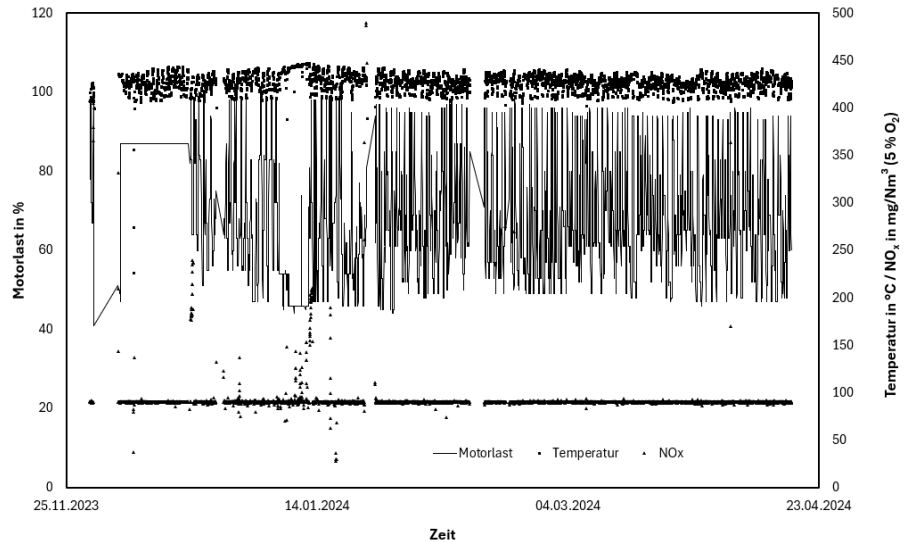


Abbildung 63: Betriebsdaten der Pilotanlage EP-DS über einen Zeitraum von fünf Monaten (Agenitor 406, 250 kWel)

d) Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit

Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen wurde festgestellt, dass die Harnstoff-Umsatzrate sehr stark von der Gastemperatur abhängt. Dies verringert die Effizienz von SCR-Systemen bei niedrigen Abgastemperaturen signifikant - insbesondere im Bereich der Schwachgasanwendungen. Aus diesem Grund wurde ein neues Projekt zur Untersuchung des Einflusses einer Vorwärmung von Harnstoff-Lösung und Zerstäubungsluft beantragt. Eine Vorwärmung verringert die Energiemenge aus dem Abgas, die notwendig ist, um den Harnstoff zu verdampfen und zu zersetzen. Dadurch besteht die Möglichkeit auch bei Anwendungen mit geringen Abgastemperaturen einen effizienten Einsatz von Harnstoff zu erzielen.

Der technischen Anforderungen sind dabei überschaubar, sodass die Entwicklung einer marktreifen Technologie mittelfrist möglich ist. Die Firma Emission Partner hat sich über eine Interessenserklärung bereit erklärt, beratend zur Seite zu stehen und das Kundennetz für potentielle Prototypen-Test zur Verfügung zu stellen.

3. Erkenntnisse von Dritten

Es sind keine Erkenntnisse von Dritten bekannt.

4. Veröffentlichungen

Auf Basis der Erkenntnisse und Ergebnisse konnten folgende wirtschaftliche und wissenschaftliche Veröffentlichungen erarbeitet werden:

Konferenz Beitrag: Jahrestreffen der DECHEMA/VDI-Fachgruppen Mehrphasenströmung, Computational Fluid Dynamics und Aerosoltechnik 2024

Ercolano, G.; Validated CFD simulation of a gas engine SCR application; DECHEMA/VDI Computational Fluid Dynamics und Aerosoltechnik 2024;

Kongress Beitrag: Biogas-Innovationskongress (1. Platz)

Ercolano, G., Post, T., Goeman D.; Double-Stack: Kompakt-SCR für BHKW bis 360 kW elektrische Leistung; 17. Biogas-Innovationskongress 2024;

Publikation (Veröffentlicht): Chemie Ingenieur Technik

Giuliano Ercolano, Bettina Stolze, Toni Dageförde, Mona al-Mqbas, Nico Jurtz, Matthias Kraume, Friedrich Dinkelacker und Ingo Hartmann; Alterungsstudie an VWT-Katalysatoren für stationäre Biogas-Motoren mithilfe der CFD; 10.1002/cite.202400108; Chemie Ingenieur Technik; 2025

Publikation (im Review): Emission Control Science and Technology (Submission 2024)

Giuliano A. Ercolano, Toni Dageförde, Mona Al-Mqbas, Nico Jurtz, Friedrich Dinkelacker, Matthias Kraume; Experimental characterization and numerical simulation of industrially manufactured two-phase nozzles; Emission Control Science and Technology (Springer)

Dissertation (in Arbeit):

Giuliano A. Ercolano; Untersuchung der Auswirkungen des Mischverhaltens von Harnstofflösung in heißen Abgasen stationärer Motoren für die SCR-Katalyse mit Hilfe der CFD, TU Berlin

Dissertation (in Planung):

Toni Dageförde; Leibniz Universität Hannover,

Studentische Arbeiten:

Stefan Griesat; Untersuchung der Streuung verschiedener Spraykenngrößen kommerzieller Zweistoffdüsen mittels Schattenwurfverfahren; Masterarbeit; 2022; Institut für Technische Verbrennung; Leibniz Universität Hannover

Julian Zihrul; Inbetriebnahme eines Heißgasprüfstands zur optischen Untersuchung des Spraynahbereichs von Zweistoffdüsen in Abgasströmungen; Studienarbeit; 2023; Institut für Technische Verbrennung; Leibniz Universität Hannover

Leonardo Frazao; Numerical Investigation of Urea-Water Spray Characteristics in a Selective Catalytic Reduction System; Masterarbeit; 2023; Institut für Prozess- und Verfahrenstechnik; TU Berlin

Julian Zihrul; Untersuchung des Zusammenhangs von Eindüsung und Ammoniakverteilung innerhalb eines SCR-Systems unter Verwendung verschiedener Mischelemente; Masterarbeit; 2024; Institut für Technische Verbrennung; Leibniz Universität Hannover

Literaturverzeichnis

- [1] A. Heilig, „Untersuchung des Primärzerfalls von Hochdruckdieselsprays mittels optischer Messtechnik“, Leibniz Universität Hannover, 2013.
- [2] T. Dageförde, K. Gröger, N. Kawaharada, und F. Dinkelacker, „Velocity Field Measurements with High Speed Structural Image Velocimetry in the Primary Atomization Region of Future Diesel Fuels“, *SAE Int. J. Adv. & Curr. Prac. in Mobility*, Bd. 3, Nr. 1, S. 378–386, Sep. 2020, doi: 10.4271/2020-01-2112.
- [3] F. Durst und M. Zare, „Laser Doppler Measurements in Two-Phase Flows“, S. 403–429, 1975.
- [4] S. Musa, M. Saito, T. Furuhashi, und M. Arai, „Evaporation Characteristics of a Single Aqueous Urea Solution Droplet“, gehalten auf der ICLASS, Kyoto, Japan, 08.-01.09 2006.
- [5] BASF, „AdBlue® by BASF: the reliable choice“. 2008.
- [6] D. T. Ryddner und M. F. Trujillo, „Modeling Urea-Water Solution Droplet Evaporation“, *Emiss. Control Sci. Technol.*, Bd. 1, Nr. 1, S. 80–97, Jan. 2015, doi: 10.1007/s40825-014-0006-3.
- [7] M. Egal, T. Budtova, und P. Navard, „The dissolution of microcrystalline cellulose in sodium hydroxide-urea aqueous solutions“, *Cellulose*, Bd. 15, Nr. 3, S. 361–370, Juni 2008, doi: 10.1007/s10570-007-9185-1.
- [8] T. J. Wang, S. W. Baek, S. Y. Lee, D. H. Kang, und G. K. Yeo, „Experimental investigation on evaporation of urea-water-solution droplet for SCR applications“, *AIChE Journal*, Bd. 55, Nr. 12, S. 3267–3276, Dez. 2009, doi: 10.1002/aic.11939.
- [9] C. L. Yaws, *Chemical Properties Handbook*. Knovel, 1999.
- [10] VDI GVC, *VDI-Wärmeatlas*, 11. Aufl. Springer Vieweg, 2013.
- [11] W. M. Haynes, D. R. Lide, und T. J. Bruno, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press, 2013.
- [12] A. M. Bernhard, D. Peitz, M. Elsener, A. Wokaun, und O. Kröcher, „Hydrolysis and thermolysis of urea and its decomposition byproducts biuret, cyanuric acid and melamine over anatase TiO₂“, *Applied Catalysis B: Environmental*, Bd. 115–116, S. 129–137, Apr. 2012, doi: 10.1016/j.apcatb.2011.12.013.
- [13] S. K. Agarwal, *Water Pollution*. AHP Publishing Corporation, 2005.
- [14] F. Birkhold, U. Meingast, P. Wassermann, und O. Deutschmann, „Modeling and simulation of the injection of urea-water-solution for automotive SCR DeNO_x-systems“, *Applied Catalysis B: Environmental*, Bd. 70, Nr. 1–4, S. 119–127, Jan. 2007, doi: 10.1016/j.apcatb.2005.12.035.
- [15] S. Fischer, „Simulation of the urea-water-solution preparation and ammoniahomogenization with a validated cfd-model for the optimization of automotive scr-systems“, Technische Universität Wien, Wien, 2012.
- [16] S. D. Yim u. a., „Decomposition of Urea into NH₃ for the SCR Process“, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Bd. 43, Nr. 16, S. 4856–4863, Aug. 2004, doi: 10.1021/ie034052j.
- [17] İ. H. Savcı, M. Z. Gül, und R. Şener, „A Validation Methodology for Urea Spray on Selective Catalytic Reduction Systems“, *J Appl. Comput. Appl. Mech.*, Bd. 53, Nr. 2, Juni 2022, doi: 10.22059/jcamech.2022.335740.709.
- [18] H. Ström, A. Lundström, und B. Andersson, „Choice of urea-spray models in CFD simulations of urea-SCR systems“, *Chemical Engineering Journal*, Bd. 150, Nr. 1, S. 69–82, Juli 2009, doi: 10.1016/j.cej.2008.12.003.

ANHANG

Teilvorhaben 1:

Experimentelle Untersuchung der Eindüsung von Harnstoff-Wasser-Lösung für SCR-Systeme von Biogas-BHKW

1. Ziel und Gegenstand des Teilvorhabens

Ziel des Teilvorhabens ist es, eine experimentelle Datenbasis bereitzustellen, um die verwendeten Simulationsmodelle, welche Grundlage des digitalen Abbilds bilden, zu kalibrieren und zu validieren. Die durchgeführten Untersuchungen am Heißgaskanal zu Spraybildung, Verdampfung und Ammoniakverteilung haben des Weiteren zum Ziel, Skalierungseffekte und funktionale Zusammenhänge aufzuzeigen.

Die Erarbeitung dieser Datenbasis erfolgt durch die schrittweise Untersuchung der gesamten SCR-Prozesskette an eigens konstruierten Mischstrecken-Prototypen. Zunächst soll eine sehr genaue Kenntnis über den Eindüsprozess mitsamt Tropfenspektren und Spraywinkeln gewonnen werden, da diese Parameter als Randbedingung für die CFD-Simulationen benötigt werden. Ein Fokus liegt dabei auf der Beschreibung des Zusammenhangs von der Art der Eindüsung mit den Betriebsbedingungen der Abgasstrecke. Der Kenntnisstand wird zudem durch Untersuchungen zu fertigungsbedingter Streuung der Düsen ergänzt. Im weiteren Verlauf werden zudem Untersuchungen zur Verdampfungslänge der Harnstofflösung durchgeführt, Tropfen-Wandinteraktionen charakterisiert und sowohl die Ammoniakgleichverteilung vor dem Katalysator geprüft.

2. Bearbeitete Arbeitspakete

AP 1.1 Charakterisierung kommerzieller Düsen

- Untersuchung von Seriendüsen hinsichtlich des Einflusses fertigungsbedingter Streuung
- Vermessung von Durchfluss, Spraywinkel und Tropfenspektren als Eingangsrandbedingungen der Simulationen
- Statistische Analyse zur Bestimmung von Unsicherheiten in den Simulationsergebnissen

AP 1.2 Aufbau der Prototypen

- Aufbau von Mischstrecken Prototypen zur optischen Analyse der Harnstoff-Eindüsung
- Konzipierung optischer Zugänge für optische Untersuchung
- Konzipierung geeigneter Integrationsmöglichkeiten für Zweistoffdüsen

AP 2.1 Messungen Spraywinkel und Charakterisierung Sprayaufbruch

- Experimentelle Untersuchung von Spraywinkel und Verhalten des Sprays im Heißgaskanal mit Fokus auf der kinematischen Interaktion von Spray und Abgasströmung im Düsennahbereich
- Aufnahme der Sprayausbreitung mittels hochauflösender Hochgeschwindigkeitsschattenverfahren zur Bestimmung von Spraywinkeln
- Untersuchung des Strömungsfeldes im Düsennahbereich durch Structural-Image-Velocimetry (SIV) zur Erstellung zweidimensionale Geschwindigkeitsfelder

AP 3.2 Messungen Verdampfungslänge

- Entwicklung hinsichtlich der Integration eines Endoskopzugangs in direkter Düsennähe zur Einbringung eines Lichtschnitts
- Messung von des Streulicht-Signals entlang der Verdampfungsstrecke
- Bestimmung von Verdampfungslängen und Sprayausbreitungsrichtungen

AP 5.1 Messungen Ammoniakgleichverteilung

- Identifizierung von relevanten Betriebspunkte und Konfigurationen
- Erarbeitung einer Methodik zur automatischen Messung in einem vorgegebenen Raster über dem Rohrquerschnitt
- Messung der Ammoniakkonzentration mittels FTIR-Spektroskopie sowie des Temperaturfelds innerhalb dieser Betriebspunkte als Datengrundlage für die Vorausberechnung der Ammoniakgleichverteilung

AP 6.2 Simulation bestehender Anlagen

- Mitarbeit bei der Aufnahme von Messwerten an regionalen Biogas-BHKW-Anlagen

AP 7.1 Projektkoordination und Publikationen

- Beteiligung an der Erstellung von Abschluss- und Zwischenberichten
- Beteiligung an Publikationen als Co-Autor
- Projektkoordination

3. Wesentliche Ergebnisse des Teilvorhabens

- Es wurden im Rahmen von AP 1.1 mehrere baugleiche Zweistoffdüsen hinsichtlich Spraywinkel, Spraygeschwindigkeit im Düsennahbereich sowie Tropfengrößen und -geschwindigkeiten vermessen, wobei signifikante Abweichungen zwischen den Düsen und den Sprayausbreitungsrichtungen beobachtet wurden. Dieses ist auf die fertigungsbedingte Streuung zurückzuführen und macht sich insbesondere bei geringen Durchflüssen bemerkbar. Diese Daten wurden als Eingangsrandbedingungen für die Simulationen verwendet.
- Auf Grundlage der Düsenvermessungen wurden die Düsenöffnungen mikroskopisch untersucht. Hier wurde festgestellt, dass der Zerstäubungsluftspalt eine erhebliche Streuung aufweist. Dieser kann an charakteristischen Positionen eine Abweichung von $\pm 25\%$ vom vorgesehenen Maß betragen.
- Im Rahmen von AP 2.1 wurden Sprayvermessungen unter dem Einfluss einer Querströmung untersucht. Es stellte sich heraus, dass innerhalb des Düsennahbereichs das Spray keine signifikante Beeinflussung durch die Querströmung aufzeigt. Aus diesem Grund wurden die ermittelten initialen Randbedingungen aus AP 1.1 auch für alle weiteren Simulationen verwendet. Downstream zeigte das Spray eine zunehmende Dynamik, sodass für diesen Fall keine Spraywinkel bestimmt werden konnten.
- Im Rahmen von AP 3.2 wurden Messungen zur Verdampfungslänge durchgeführt. Dazu wurde ein Lichtschnitt endoskopisch in das Spray eingebracht und das an den Tropfen entstehende Streulicht über die optischen Zugänge der Heißgasstrecke erfasst. Die Ergebnisse sind auf den ersten Blick widersprüchlich, da bei höheren Gas-Temperaturen größere Eindringtiefen erfasst werden. Dies ist auf eine signifikante Verringerung der Gas-Dichte zurückzuführen, welche mit dem Konstant halten der Strömungsgeschwindigkeit einhergeht.
- Die Verdampfung ist in allen Fällen vor dem Auftreffen auf die Rohrwand oder potentielle Einbauten vollständig verdampft, sodass die Bearbeitung von AP 4.1 entfällt.
- Im Rahmen von AP 5.1 wurden Messung der Ammoniakgleichverteilung mit 89 Stützstellen über dem Rohrquerschnitt mittels FTIR-Spektroskopie durchgeführt. Die Ammoniakgleichverteilung wird erheblich durch eine hohe Zerstäubungsluftmenge begünstigt - es besteht zudem eine Abhängigkeit von der Gasgeschwindigkeit. Der Einsatz eines Mischers erweist sich ebenfalls als sinnvoll, wobei der Effekt des Mischers in einigen Betriebspunkten nur schwach ausgeprägt ist.

Teilvorhaben 2:

Entwicklung eines CFD-basierten Auslegungstools für die SCR - Abgasnachbehandlung in Biogas-BHKW

1. Ziel und Gegenstand des Teilvorhabens

Das Hauptziel dieses Teilprojekts ist die Entwicklung eines stabilen numerischen Ansatzes, der in der Lage ist, die komplexen, gleichzeitig ablaufenden Mechanismen bei der Abgasnachbehandlung zu erfassen. Darüber hinaus zielt dieses Teilprojekt darauf ab, die Empfindlichkeit und allgemeine Genauigkeit der Teilmodelle zu untersuchen, die in den folgenden Arbeitspaketen verwendet werden.

Ziel dieses Teilprojekts ist zum einen die Entwicklung eines effizienten numerischen Ansatzes zur Erfassung der Sprayeigenschaften und der Tröpfchengrößenverteilung. Zweitens soll untersucht werden, ob eine Optimierung der geometrischen Konfiguration der Düse möglich ist. Drittens soll die Verdunstung von Wasser und Harnstoff genau modelliert werden. Viertens wird die Wechselwirkung zwischen den Tröpfchen und der Wand auf einer Platte in der Nähe der Düse untersucht. Schließlich werden die bisherigen Methoden in einen robusten digitalen Arbeitsablauf integriert, der eine genaue Vorhersage der Ammoniakverteilung ermöglicht.

2. Bearbeitete Arbeitspakete

AP 1.2 Grundgerüst des digitalen Abbilds

- Modellierung der Eindüsung und der Verteilung des Tropfendurchmessers
- Integrierter numerischer Rahmen
- Studie über die Konvergenz der Netze
- Sensitivitätsstudie zur Turbulenzmodellierung

AP 2.3 Simulation Sprayausbreitung

- Es wurde eine Studie durchgeführt, um die Empfindlichkeit der Parzellennummern zu bewerten.
- Es wurde ein Ansatz zur Modellierung von Flüssigkeitssprays entwickelt.
- Analyse und Validierung anhand der Versuchsergebnisse.

AP 2.4 Designstudie

- Erstellung der Designstudie
- Modifizierung der geometrischen Merkmale der Düse
- Analyse des Einflusses des Neigungswinkels der Düse in Bezug auf den Gleichmäßigkeitsindex der Tröpfchenverteilung im Abgasrohr DN300.

AP 3.1 Simulation Verdampfungslänge

- Integration der vom Emissionspartner zur Verfügung gestellten Literaturdatenbank in die numerischen Simulationen.
- Validierung der Verdampfungsrate und -länge auf der Grundlage von Experimenten. Die Sprayverdampfungslänge ist stark von der Abgastemperatur abhängig. In allen untersuchten Fällen hatte das Spray eine schnelle Verdampfungsrate und wurde innerhalb von 300 mm vor der Düse vollständig verdampft.

AP 4.2 Simulation Wandinteraktion

- Vorbereitung der Simulation, die die CAD-Konfigurationen des Mischers und der Platte in der Nähe der Düse umfasst
- Analyse der Wechselwirkung der Tröpfchenwand mit dem Mischer und der Platte beim Einspritzen von Wasser als Spray.
- Aufgrund der schnellen Verdampfung des Sprays und der Abgasströmungsmuster kommt es weder zu einer Wechselwirkung zwischen Tropfen und Wand noch zu einer Filmbildung an den Wänden. Aus diesem Grund wurden keine weiteren Untersuchungen durchgeführt.

AP 5.2 Validierung Fluidynamik, Energie und Stofftransport

- Entwicklung eines numerischen Ansatzes zur Simulation der thermischen Zersetzung von Harnstoff in Ammoniak. Einschließlich Eindüsung, Verdampfung, Hydrodynamik und chemische Reaktionen.
- Vergleich mit der Literatur zur Ermittlung der Kalibrierungskonstanten.
- Studien zur Sensitivität
- Validierung des entwickelten numerischen Ansatzes anhand der experimentellen Ergebnisse von AP 5.1 durch Kalibrierung der chemischen Reaktionsmodelle.

AP 6.2 Simulation bestehender Anlagen

- CAD-Vorbereitungen der Geometrie der Echtzeitanwendungen.
- Die Strömungs- und Thermoanalyse wurde mit Hilfe des entwickelten numerischen Ansatzes durchgeführt.
- Validierung der kalibrierten numerischen Simulationen für die Konzentration und Gleichmäßigkeit der Verteilung von Ammoniak und der erhaltenen Lösung des Temperaturfeldes.

AP 7.1 Projektkoordination und Publikationen

- Beteiligung an der Erstellung von Abschluss- und Zwischenberichten
- Beteiligung an Publikationen als Co-Autor
- Mitarbeit an der Erstellung des mit diesem Projekt verbundenen Forschungsartikels in den Bereichen Konzeption, Datenaufbereitung und Revision.

3. Wesentliche Ergebnisse des Teilvorhabens

- Es wurde ein effizienter Ansatz zur Modellierung des Eindüsens von Harnstoff-Wasser-Lösung (als Teil von AP 1.2 und AP 2.3) entwickelt, wobei der Schwerpunkt auf der Verteilung der Tröpfchen und dem Spraywinkel lag. Angesichts der Auswirkungen der Abgasquerströmung und der schnellen Verdampfung hat sich die Modellierung des Zweiflüssigkeits-Sprays als eine einzige (nur flüssige) Phase unter Einbeziehung der Trägheitseffekte der Luft als angemessen erwiesen.
- Es wurden umfangreiche Sensitivitätsanalysen durchgeführt, um die Auswirkungen der numerischen Gitterauflösung und verschiedener Turbulenzmodelle zu untersuchen.
- Die Studie zur Auslegung der Düsengeometrie (durchgeführt im Rahmen von AP 2.4) hat gezeigt, dass eine Verbesserung der Gleichmäßigkeit der Tropfenverteilung um maximal 4 % erreicht werden kann, wodurch eine Änderung des Düsenneigungswinkels sowohl im experimentellen als auch im numerischen Aufbau überflüssig wird.
- Der numerische Aufbau (AP 3.1) berücksichtigt die Verdunstung der Tröpfchen.
- Aufgrund der schnellen Verdampfung der Tröpfchen und der DN300-Konfiguration wurden keine Wechselwirkungen zwischen Tröpfchen und Wand oder Filmbildung beobachtet. Numerische Untersuchungen in AP 4.3 bestätigten, dass weitere Studien in diesem Bereich unnötig waren.
- Die Kalibrierung des chemischen Reaktionsmodells wurde unter Verwendung von Werten durchgeführt, die aus bestehenden Literaturquellen abgeleitet wurden, wobei Anpassungen der turbulenten Massen- und Wärmeübertragungsparameter, einschließlich der Schmidt- und Prandtl-Zahlen, vorgenommen wurden, um eine erfolgreiche Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu erreichen.
- Ein robuster numerischer Arbeitsablauf, der Eindüsung, Verdampfung und chemische Reaktionen integriert (AP 5.2), wurde entwickelt und anhand der experimentellen Datenbank von AP 5.1 validiert. Der kalibrierte Ansatz erwies sich als zuverlässig, mit einer maximalen Abweichung von 8% für die globale durchschnittliche Ammoniakverteilung.
- Der entwickelte numerische Ansatz wurde auch zur Vorhersage der Ammoniakverteilung vor dem Katalysatoreintritt in zwei Anwendungen eingesetzt. Die vorhergesagte mittlere Temperatur und Ammoniakkonzentration zeigten eine gute Übereinstimmung mit den Echtzeitdaten (innerhalb von 5 %), obwohl lokale Vergleiche Abweichungen von bis zu 20 % ergaben, die wahrscheinlich auf Einschränkungen der Messgenauigkeit zurückzuführen sind.

Teilvorhaben 3:

Feldvalidierung und Begleitung der Entwicklung einer computergestützten Auslegung zur SCR Abgasnachbehandlung von Biogas-BHKW

1. Ziel und Gegenstand des Teilvorhabens

Emission Partner GmbH & Co. KG ist als Projektpartner insbesondere für die Feldvalidierung verantwortlich. Die computergestützte Analyse des Sprays für eine SCR-Abgasnachbehandlung mit einem realen Bezug in der Anwendung auf einem Biogas BHKW wird unterstützend begleitet. Randbedingungen und Anforderungen aus dem konkreten Anwendungsfall werden definiert, sodass sowohl die laborseitigen Messungen als auch die anschließende Umsetzung in der digitalen Nachbildung eine direkte Implementierung im Feld bilden.

Hieraus leitet sich direkt ab, dass aus Anwendungsfällen die Randbedingungen für den Prototypen definiert werden. Die Geometrie des Prototyps ist anschließend in einer Realanlage zu integrieren. Übergeordnet und langfristig werden die erarbeiteten Methoden und Erkenntnisse direkt in der Applikation von SCR-Nachbehandlungssystemen implementiert. Daher werden insbesondere im Bereich der Simulation die Arbeitspakete mitverfolgt und entwickelt.

2. Bearbeitete Arbeitspakete

Arbeitspaket 1.2: Aufbau Prototypen und Grundgerüst „Digitales Abbild“

- Identifikation der konstruktiven und Applikationsseitigen Randbedingungen von Mischstrecken
- Ableitung von Randbedingungen für den Mess- und Teststand
 - o Maximale Abgastemperatur von 500 °C
 - o Heiße Abgasgeschwindigkeit von maximal 25 m/s
 - o NO_x-Reduktionsziel von 80 % (NO_x ein = 500 mg/Nm³; NO_x aus < 100 mg/Nm³)
- Unterstützung bei der Definition der Anforderungen an den Prototypen einer Identifikation von potenziellen Realanlagen

Arbeitspaket 2.3: Simulation Sprayausbreitung

- Erweiterung des bestehenden Ein-Phasen-Ansatzes
- Entwicklung von Methoden zur Implementierung des Zwei-Phasen-Ansatzes für die Beschreibung Des Sprays und dessen Eigenschaften
- Simulation von charakteristischen Betriebspunkten zur Validierung des Zwei-Phasen-Ansatzes

Arbeitspaket 3.1: Simulation Tropfenverdampfung

- Entwicklung eines thermodynamischen Modells für die Harnstoff-Wasserlösung auf Basis von Literaturdaten und dem Ansatz der scheinbaren Eigenschaften
- Validierung des thermodynamischen Modells anhand experimenteller Literaturdaten, sowie Simulationsdaten von weiteren Arbeitsgruppen und wissenschaftlichen Veröffentlichungen
- Simulation der Verdampfungslänge von HWL

Arbeitspaket 5.1: Messung Ammoniakgleichverteilung

- Erarbeiten einer Methodik zur Ermittlung der Ammoniakgleichverteilung
- Bereitstellung von Material und Informationen für die Messung der Ammoniakgleichverteilung

Arbeitspaket 6.1: Parametervariation zur Prüfung des „Digitalen Abbilds“

- Simulation einer bestehenden SCR-Applikation. Variation der Randbedingungen entsprechend der Realmessdaten
- Auswertung
- Arbeitspaket 6.2: Simulation bestehender Applikation. Organisation und Durchführung von Messungen bei Kundenanlagen
- Aufbereitung der Anlagen und Messdaten
- Bereitstellung der Anlagendaten und Geometrien

3. Wesentliche Ergebnisse des Teilvorhabens

- Identifikation der Randbedingungen für Mischstrecken
- Entwicklung des Zwei-Phasen-Ansatzes zur Beschreibung des Sprays und seinen Eigenschaften mit erhöhter Übereinstimmung gegenüber den experimentellen Ergebnissen
- Entwicklung und Validierung eines thermodynamischen Modells für Harnstoff-Wasser-Lösung
- Simulation der notwendigen Verdampfungslänge von Harnstoff-Wasser-Lösung in heißem Gas
- Validierung von Simulationsergebnissen mit Felddaten